

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

جامعة سعد دحلب البلدية
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك
Département d'Électronique



Mémoire de Master

Filière ELECTRONIQUE
OPTION : MICROELECTRONIQUE

Code : Micro1

présenté par

Benturki Billel et Zarour Oussama

Simulation et optimisation de la structure à puits quantique contraint à base d'InGaAsSb/InGaSb pour les applications optoélectroniques

Proposé Par

M^{me}. Chenini Lynda

M^r. Aissat Abdelkader

2024-2025

Remerciements

*On exprime toute notre reconnaissance au grand DIEU,
Maître des temps et des circonstances ; de nous avoir donné la
force et la volonté durant toutes ces années d'études afin que
nous puissions arriver à ce stade.*

*Nos remerciements particuliers à notre promotrice, M^{me}
CHENINI LYNDIA. Merci pour votre confiance et votre
patience. Le soutien et les conseils qu'elle nous a apportés tout
au long de ce travail, nous ont permis de réaliser ce mémoire
dans des conditions favorables à l'approfondissement de notre
réflexion. Travailler avec elle a été une expérience agréable.*

*On remercie également notre promoteur Mr A. Aïssat d'avoir
guidé et dirigé ce travail, nous lui sommes très reconnaissants
pour ses précieux conseils.*

*On remercie infiniment les membres du jury qui ont accepté
d'examiner ce travail.*

Dédicaces

Je dédie entièrement ce travail, fruit de plusieurs années d'efforts et de persévérance, à ceux qui ont toujours cru en moi, soutenu mes rêves et accompagné mes pas.

À mes chers parents, pour leur amour inconditionnel, leurs sacrifices silencieux et leur foi inébranlable en mes capacités. Sans vous, rien de tout cela n'aurait été possible.

À mes frères et sœurs, compagnons de route fidèles, pour leur soutien constant, leurs encouragements sincères et leur présence rassurante dans les moments de doute.

À mes amis, merci pour vos mots d'encouragement, votre écoute, vos sourires et votre bienveillance. Je vous souhaite à tous une vie pleine de succès et de bonheur.

Une dédicace toute particulière à Madame Chenini Lynda, ma promotrice, pour sa précieuse orientation, sa disponibilité, sa rigueur scientifique et son accompagnement exemplaire tout au long de ce travail. Votre confiance et votre encadrement ont été une source d'inspiration et de motivation permanente.

Billel

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail

*À mes chers parents, pour leur amour inconditionnel, leurs sacrifices silencieux et leur foi inébranlable en mes capacités.
Sans vous, rien de tout cela n'aurait été possible.*

À mes frères, compagnons de route fidèles, pour leur soutien constant, leurs encouragements sincères et leur présence rassurante dans les moments de doute.

À mes amis, merci pour vos mots d'encouragement, votre écoute, vos sourires et votre bienveillance. Je vous souhaite à tous une vie pleine de succès et de bonheur.

Une dédicace toute particulière à Madame Chenini Lynda, en témoignage de ma profonde reconnaissance, pour son accompagnement constant et ses précieux conseils, son engagement et sa vision ont été une source d'inspiration tout au long la préparation de ce travail.

Oussama

ملخص

يهدف هذا البحث إلى إجراء محاكاة وتحليل تحسين لتكوين بئر كمي متوتر من نوع InGaAsSb/InGaSb لاستخدامه في الإلكترونيات الضوئية. ركزنا في البداية على دراسة الخصائص الإلكترونية الضوئية الأساسية التي تُحدد هذا التكوين. ثم بحثنا في كيفية تأثير خليط الإنديوم (داخل البئر والحاجز) والزرنيخ على معامل الكسب البصري. لتحسين معامل الكسب، من الضروري خفض جميع مستويات التراكيز. يلعب الإنديوم دورًا أساسيًا في تغيير طول موجة الانبعاث. ويمكن ضبط هذا الطول الموجي ضمن طيف الأشعة تحت الحمراء وفقًا لمتطلبات التطبيق المحددة.

الكلمات الدالة:

In_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}/InGaSb ، الكسب البصري ، الكسب البصري

Résumé

Le but de ce travail est de mener une étude de simulation et d'optimisation de la structure à puits quantique contraint à base d'InGaAsSb/InGaSb pour les applications optoélectroniques. Nous nous sommes d'abord intéressés à l'étude des principales propriétés optoélectroniques qui caractérisent cette structure. Nous avons ensuite étudié l'effet de la combinaison de l'indium (dans le puits et la barrière) et de l'arsenic sur le coefficient du gain optique. L'augmentation du coefficient de gain nécessite de diminuer les valeurs de toute les concentrations. L'indium a un rôle crucial sur le déplacement de la longueur d'onde d'émission. Cette dernière peut être ajustée dans le domaine de l'infrarouge en fonction de l'application souhaitée.

Mots clés :

In_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}/InGaSb, optoélectronique, gain optique, interbandes.

Summary

The purpose of this research is to perform a simulation and optimization analysis of the InGaAsSb/InGaSb strained quantum well configuration for use in optoelectronics. Initially, we focused on examining the primary optoelectronic characteristics that define this configuration. Subsequently, we investigated how the mixture of indium (within the well and the barrier) and arsenic influenced the optical gain coefficient. To enhance the gain coefficient, it is necessary to lower all concentration levels. Indium plays an essential role in altering the emission wavelength. This wavelength can be tuned within the infrared spectrum based on the specific application requirements.

Key words:

In_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}/InGaSb, optoelectronic, optical gain, interbands.

Table des matières

Remerciements

Dédicaces

Résumé

Table des matières

Liste des abréviations

Liste des figures

Liste des tableaux

Introduction générale.....1

Chapitre 1 : Notions fondamentales sur les semiconducteurs

1.1. Introduction 3

1.2. Les semiconducteurs : entre conducteurs isolants4

1.3. Classification des matériaux.....4

1.4. Les structures cristallines...5

1.5. Zone de Brillouin et directions cristallographiques6

1.6. Structure de bande : la base énergétique des semiconducteurs8

1.7. Gap direct et indirect 8

1.8. Notion de trous et spin-orbite9

1.9. Les alliages...10

1.10. L'épitaxie.....11

1.11. La contrainte.....12

1.12. Les défauts cristallins13

1.13. Puits quantiques et niveaux énergétiques15

1.14. Les décalages de bandes ΔE_c et ΔE_v17

1.15. Taux de confinement18

1.16. Spectre électromagnétique et domaines d'applications.....18

1.17. Le gain optique 20

1.18. Conclusion21

Chapitre 2 : Résultats et discussions

2.1. Introduction	22
2.2. Structure à étudier	22
2.3. Paramètre de maille	23
2.4. Contrainte	24
2.5. Energie spin-orbite.....	26
2.6. Energie de la bande interdite	27
2.7. Effet de la température sur l'énergie de gap	29
2.8. Masse effective des différents porteurs de charge	31
2.9. Décalage des bandes ΔE_c et ΔE_v	33
2.10. Gain optique	35
2.11. Conclusion.....	37
Conclusion générale.....	38

Références

Listes des acronymes et abréviations

a_e : Paramètre de maille de la couche épitaxiée.

a_c : Potentiel hydrostatique de déformation de la bande de conduction.

a_s : Paramètre de maille du substrat.

a_v : Potentiel hydrostatique de déformation de la bande de valence.

As : Arsenic.

BC : Bande de conduction.

BV : Bande de valence.

c : vitesse de la lumière dans le vide.

C_{ij} : Coefficients d'élasticités.

E_g : Energie de la bande interdite.

E_g^{cont} : Energie de la bande interdite contrainte.

E_g^{ncont} : Energie de la bande interdite non contrainte.

E_{hh} : Énergie de la bande de trous lourds.

E_i : Energie au niveau i .

E_{lh} : Énergie de la bande de trous légers.

$E_{v,moy}$: Energie moyenne de la bande de valence.

Ga : Gallium.

h : Constante de Planck.

In :Indium.

L_p : Largeur du puits quantique.

m_e^* : Masse effective de l'électron.

m_0 : Masse effective de l'électron dans le vide.

n : Indice de réfraction.

Sb : Antimoine.

T : Température

x : Concentration d'indium dans l'alliage InGaAsSb.

y : Concentration de l'antimoine.

z : Concentration d'indium dans l'alliage InGaSb.

Δ_a : Désaccord paramétrique.

λ : Longueur d'onde.

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$: Paramètres de Luttinger.

ε : Déformation hydrostatique.

γ : Coefficient de poisson.

Δ_0 : Énergie de décalage spin-orbite.

ΔE_{sh} : Décalage énergétique induit par la contrainte de cisaillement

ΔE_{hh} : Décalage d'énergie de la bande de trous lourds.

ΔE_{lh} : Décalage d'énergie de la bande de trous légers.

ϵ_0 : Permittivité du vide.

λ : Longueur d'onde.

$\epsilon_{//}$: Déformation bi-axiale.

$\epsilon_{\perp}$: Déformation uni-axiale.

K : Constante de Boltzmann.

Δ : Laplacien.

Ψ : Fonction d'onde

Liste des figures

Figure 1.1. Configuration de la bande des trois types de matériaux	3
Figure 1.2. Les systèmes cristallins	6
Figure 1.3. Zone de Brillouin d'une structure CFC	7
Figure 1.4. Directions cristallographiques.....	7
Figure 1.5. Gap direct et indirect	8
Figure 1.6. Impact du couplage spin-orbite sur la bande d'énergie effective d'un semiconducteur à bande interdite directe	9
Figure 1.7. Effet de la contrainte sur la structure de bandes	13
Figure 1.8. Différents types de défauts ponctuels.....	14
Figure 1.9. Glissement de plans atomiques	15
Figure 1.10. a) Niveaux d'énergie d'un puits quantique de largeur L, b) fonction d'ondes ...	16
Figure 1.11. Décalages de bandes ΔE_c et ΔE_v	17
Figure 1.12. Le spectre électromagnétique	18
Figure 2.1. Illustration de la structure à puits quantique InGaAsSb/InGaSb.....	22
Figure 2.2. Variation du paramètre de maille en fonction de la concentration d'In et d'As de l'alliage InGaAsSb.....	23
Figure 2.3. Variation du paramètre de maille de la barrière en fonction de la concentration d'In	24
Figure 2.4. Variation de la contrainte en fonction d'In et d'As pour une valeur d'In dans le substrat de 0.2	25
Figure 2.5. Variation de la contrainte en fonction d'In et d'As pour une valeur d'In dans le substrat de 0.3	25
Figure 2.6. Variation de l'énergie spin-orbite en fonction d'In et d'As dans l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$	26
Figure 2.7. Variation de l'énergie spin-orbite en fonction d'In dans l'alliage $\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{Sb}$	27
Figure 2.8. Evolution de l'énergie du gap en fonction des concentrations d'indium et d'arsenic pour l'alliage InGaAsSb	28
Figure 2.9. Evolution de l'énergie du gap en fonction de la concentration d'indium pour l'alliage InGaSb	29
Figure 2.10. Variation de l'énergie de gap en fonction de T pour plusieurs concentrations en indium.....	30

Figure 2.11. Variation de l'énergie de gap en fonction de T pour plusieurs concentrations en arsenic	30
Figure 2.12. Variation de $E_g(T)$ pour plusieurs concentrations en In dans le substrat	31
Figure 2.13. Masse effective en fonction des concentrations d'In dans le puits.....	31
Figure 2.14. Masses effective en fonction des concentrations d'As dans le puits	32
Figure 2.15. Masse effective en fonction des concentrations d'In dans la barrière	32
Figure 2.16. Variation de ΔE_c en fonction de x de la structure $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Sb}$..	33
Figure 2.17. Variation de ΔE_c en fonction de x de la structure $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{Sb}$...	34
Figure 2.18. Variation de ΔE_v en fonction de x de la structure $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Sb}$..	34
Figure 2.19. Variation de ΔE_v en fonction de x de la structure $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{Sb}$...	35
Figure 2.20. Variation du gain en fonction de λ pour différentes concentrations d'In, ($y=0.2$ et $z=0.2$).....	36
Figure 2.21. Variation du gain en fonction de λ pour différentes concentrations d'In, ($y=0.4$ et $z=0.2$).....	36
Figure 2.22. Variation du gain en fonction de λ pour différentes concentrations d'In, ($y=0.4$ et $z=0.3$).....	37

Liste des tableaux

Tableau 1.1. Les alliages ternaires et quaternaires	10
Tableau 2.1. Valeurs des paramètres de maille	23
Tableau 2.2. Energie de gap des matériaux	28
Tableau 2.3. Paramètres de Bowing des matériaux ternaires	28
Tableau 2.4. Paramètres de Varshni à $T = 0K$	29

Introduction générale

Un puits quantique désigne une région de l'espace où l'énergie expérimentée par une particule quantique est à son niveau le plus bas. C'est un puits de potentiel dont les dimensions réduites créent un écart entre les prévisions de la mécanique classique et celles de la mécanique quantique [1]. Les puits quantiques consistent en des superpositions de couches cristallines disposées de manière alternée, qui peuvent atteindre des épaisseurs aussi fines que quelques monocouches atomiques, composées de semiconducteurs ayant des compositions chimiques variées.

Un puits quantique en semiconducteur est créé en plaçant un semiconducteur avec une bande interdite à faible énergie (E_g) entre deux couches de semiconducteurs qui ont le même paramètre de maille et une bande interdite plus élevée ($E_{g'}$). Dans le cas d'un puits quantique de type I, où ($E_g < E_{g'}$), les bandes de conduction et de valence du matériau puits se situent à l'intérieur du gap du matériau ayant un gap plus élevé. Cela entraîne une restriction du mouvement des électrons et des trous dans une dimension tout en permettant une liberté de mouvement dans les deux autres dimensions. La dynamique des porteurs de charges dans la direction où ils sont confinés devient quantifiée, ce qui crée des bandes d'énergie. Ces niveaux d'énergie sont appelés sousbandes.

Une transition interbandes, dans le domaine de la physique des matériaux, désigne un phénomène électronique durant lequel un électron migre de la bande de valence à la bande de conduction. Ce déplacement requiert souvent l'absorption ou l'émission de photons ayant une énergie qui correspond à la différence d'énergie (écart de bande) entre les deux bandes.

Le phénomène de gain optique dans un puits quantique découle de la migration des électrons de la bande supérieure vers la bande inférieure, ce qui entraîne une intensification de la lumière à une longueur d'onde particulière. Ce processus se manifeste lorsqu'un électron au sein d'un puits quantique reçoit un photon, se trouve excité, puis est réémis, entraînant une amplification lumineuse [2].

Les dispositifs à puits quantiques à base de transitions interbandes sont intégrés dans les lasers à puits quantiques, qui servent de sources de lumière compactes et performantes, utilisées dans des secteurs tels que les télécommunications, la médecine et le traitement des matériaux. De nombreux éléments impactent le gain optique dans un puits quantique, tels que la densité des porteurs, la configuration du puits quantique, les tailles et les matériaux du puits quantique,

ainsi que la température. Le gain optique dans les puits quantiques se révèle être une propriété cruciale qui rend ces structures parfaites pour la production et l'amplification de lumière, avec diverses applications dans différents domaines.

L'objectif de ce travail est de réaliser une étude sur les propriétés optoélectroniques d'une structure à puits quantique InGaAsSb/InGaSb.

Le premier chapitre sera dédié à l'examen des propriétés fondamentales des matériaux semiconducteurs de type III-V, en démarrant par une vue d'ensemble sur ces matériaux. Ensuite, nous nous pencherons sur leur réseau cristallin ainsi que sur la configuration de leurs bandes d'énergie. Nous fournirons aussi les formules essentielles qui nous permettront d'effectuer nos simulations, telles que le calcul de la contrainte et les niveaux d'énergie.

Dans le deuxième chapitre, nous examinerons la structure InGaAsSb/InGaSb en précisant les propriétés optoélectroniques importantes. Il sera donc pertinent d'analyser l'impact de la variation des concentrations en indium et en arsenic sur les caractéristiques de cette structure, notamment en ce qui concerne le coefficient de gain optique.

Pour conclure, nous finirons par une conclusion générale qui résume les résultats principaux obtenus dans cette étude.

Chapitre 1 : Notions fondamentales sur les semiconducteurs

1.1.Introduction

Les semiconducteurs sont des matériaux dont les caractéristiques de conductivité électrique se situent entre celles des métaux et des isolants, comme illustré dans la figure 1.1. Cette figure présente les structures de bande de trois catégories de matériaux : les isolants, les métaux et les semiconducteurs. Cette illustration montre que la distinction se trouve dans la distance énergétique entre les bandes de valence et de conduction.

Dans le cas des isolants, cet écart est significatif, atteignant environ dix électrons-volts. En revanche, pour les métaux, il n'existe pas de telle différence, car les bandes de valence et de conduction se superposent, autorisant un flux facile des électrons, ce qui génère un courant électrique.

Pour les semiconducteurs, le passage des électrons entre les bandes de valence et de conduction n'est réalisable que si une certaine quantité d'énergie est fournie, par exemple via des photons, afin de surmonter la bande interdite, également nommée gap, dont l'épaisseur varie de 0,1 à 4 eV selon le type de matériau. À zéro Kelvin, équivalent au zéro absolu, un semiconducteur se comporte comme un isolant, ce qui n'est pas le cas pour un métal. Les composants semiconducteurs sont cruciaux pour les avancées technologiques actuelles, englobant des domaines tels que la microélectronique et l'énergie solaire. Pour appréhender leur essence, il est essentiel d'étudier non seulement leur catégorisation en tant que matériaux, mais aussi leur architecture atomique et les principes de la physique des cristaux qui les influencent.

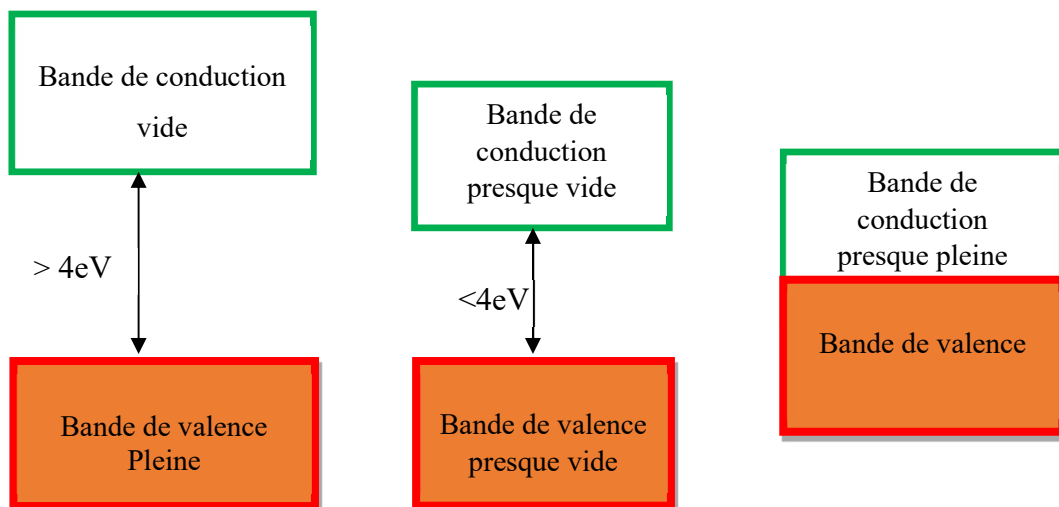


Figure 1.1. Configuration de la bande des trois types de matériaux.

1.2. Les semiconducteurs : entre conducteurs et isolants

Un semiconducteur représente un type de matériau dont les caractéristiques électriques se situent entre celles des conducteurs, tels que les métaux, et des isolants, comme le verre. Cette propriété intermédiaire découle de l'agencement spécifique de leurs bandes d'énergie, permettant ainsi d'ajuster leur conductivité en fonction de la température, de la lumière ou par l'introduction d'impuretés, un processus souvent nommé dopage.

Des exemples courants incluent le silicium (Si) et le germanium (Ge), largement exploités dans les composants électroniques.

1.3. Classification des matériaux

Les matériaux peuvent être catégorisés de diverses manières en fonction de leurs caractéristiques électriques. Les deux principales catégories en physique des semiconducteurs sont : la **résistivité électrique** et la configuration des bandes (comme montré dans la figure 1.1).

1.3.1. Classification par résistivité

La résistivité électrique évalue l'aptitude d'un matériau à entraver le flux de courant. À partir de cela, on peut définir trois principales catégories :

- **Les conducteurs** (tel que les métaux comme le cuivre et l'argent) affichent une résistivité très faible. Les électrons y circulent sans entrave.
- **Les isolants** (comme le verre ou le plastique) présentent une résistivité très élevée, rendant quasiment impossible la conduction.
- **Les semi-conducteurs** (comme le silicium ou le germanium) possèdent une résistivité intermédiaire, pouvant être ajustée selon divers facteurs (température, dopage, lumière, etc.).

Cette typologie est utile pour l'ingénierie et la création de circuits, mais elle ne reflète pas les mécanismes internes à l'échelle microscopiques.

1.3.2. Classification par structure de bande

La structure de bande permet d'analyser les propriétés des matériaux à un niveau quantique. En effet, selon la disposition des **bandes d'énergie** (de valence et de conduction), on peut distinguer :

- **Les conducteurs** : ici, la bande de conduction est soit partiellement remplie, soit chevauche la bande de valence. Il n'y a pas de bande interdite significative.
- **Les isolants** : ceux-ci possèdent un écart d'énergie important (supérieur à 4 eV), empêchant le transfert spontané des électrons vers la bande de conduction.
- **Les semiconducteurs** : cette catégorie présente un écart modéré (entre 0,1 eV et 4 eV). Les électrons peuvent être excités vers la bande de conduction grâce à des influences externes (comme la chaleur ou la lumière).

Cette classification est essentielle pour appréhender les processus de conduction, l'absorption de la lumière, et le développement de dispositifs optoélectroniques.

1.4. Les structures cristallines

Les matériaux solides peuvent se former en sept types de structures cristallines (figure 1.2), caractérisées par l'agencement des atomes dans l'espace :

- Triclinique : aucune symétrie avec des angles et des longueurs différentes.
- Monoclinique : deux angles droits avec une inclinaison.
- Orthorhombique : trois axes perpendiculaires mais ayant des angles inégales.
- Tétragonale : deux côtés de même longueur et un différent.
- Rhomboédrique (ou trigonale) : des angles semblables mais non à 90 degrés.
- Hexagonale : deux longueurs identiques dans un plan formant un angle de 120°, plus un axe perpendiculaire.
- Cubique : trois axes égaux et perpendiculaires.

Parmi ces structures, la cubique (notamment la variante à faces centrées, ou CFC) est la plus bénéfique pour les semiconducteurs. Elle fournit une symétrie maximale, ce qui favorise la conduction électrique et une croissance cristalline régulière. Le silicium, qui est le matériau fondamental en électronique, présente une structure cubique en diamant. En revanche, la

structure hexagonale, bien que plus compacte (comme le nitrure de gallium), se révèle moins isotrope, ce qui peut rendre plus complexe le contrôle de certaines propriétés directionnelles.

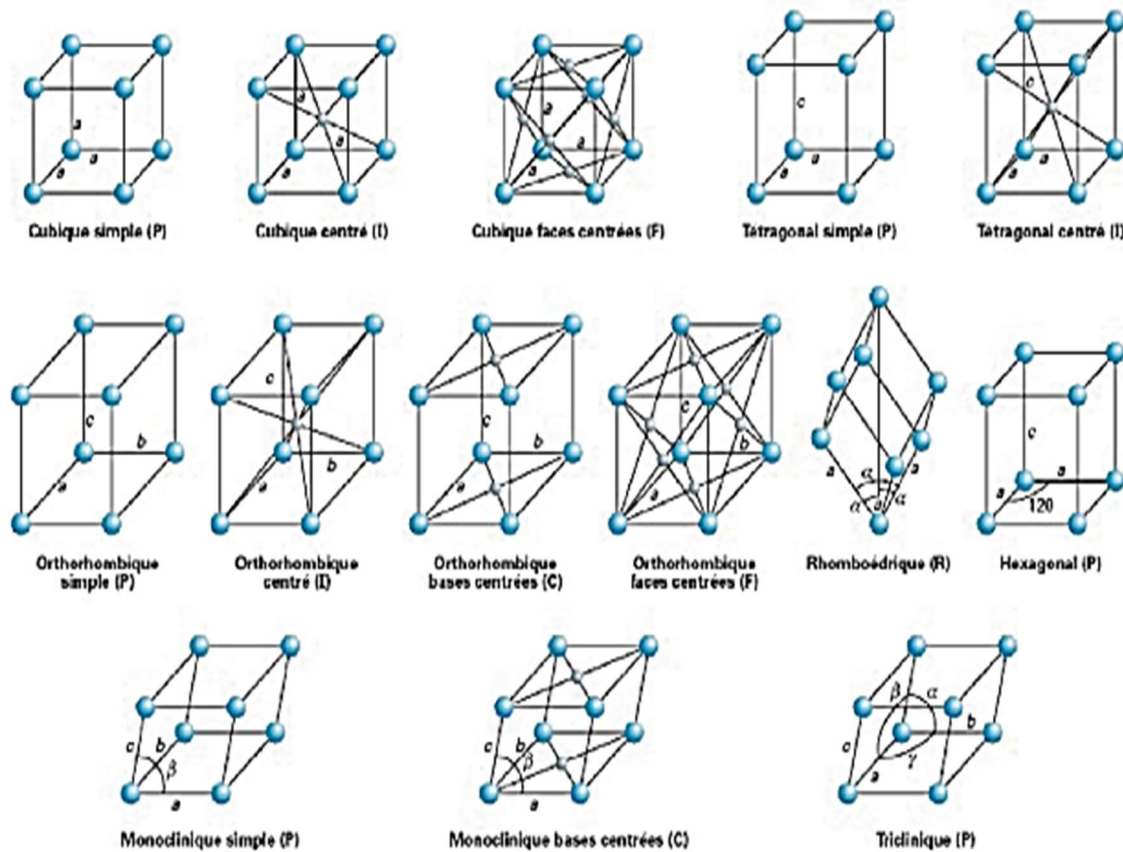


Figure 1.2. Les systèmes cristallins [3].

1.5. Zone de Brillouin et directions cristallographiques

La zone de Brillouin (figure 1.3) est une représentation géométrique dans l'espace réciproque, essentielle pour analyser les caractéristiques des électrons au sein d'un cristal. Cette zone définit les espaces où les ondes électroniques peuvent être en interaction avec le réseau périodique.

Des points spécifiques tels que X, L, K ou Γ (gamma) se rapportent à des orientations de grande symétrie dans la structure de bande. Ils permettent de prédire des phénomènes tels que les transitions d'énergie soient directes ou indirectes.

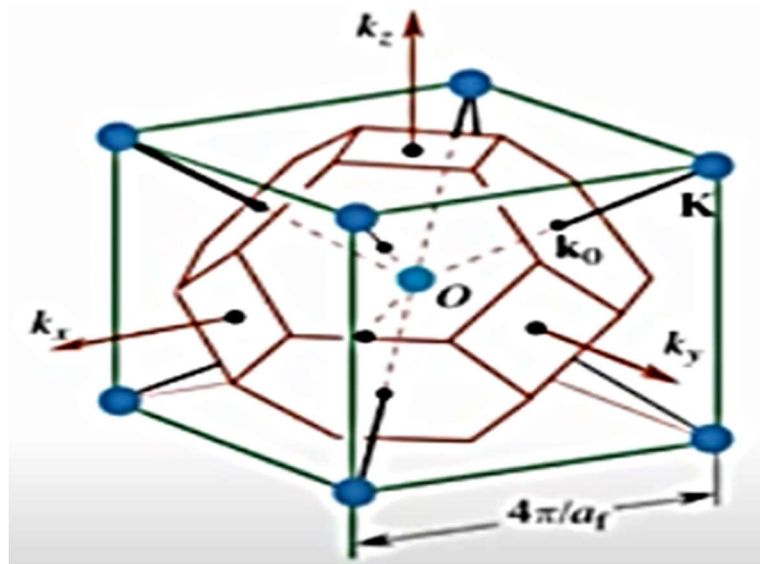


Figure 1.3. Zone de Brillouin d'une structure CFC.

Les cristaux sont des empilements ordonnés de cellules unitaires, qui peuvent être caractérisées par les directions cristallographiques (figure 1.4) correspondant aux droites qui passent par plus d'un point du réseau. Un vecteur avec des coordonnées (1,1,1) se situera sur une ligne ayant une orientation (222) et ainsi de suite, cette orientation sera désignée par [111] où les chiffres font référence aux indices du vecteur de la direction. Les valeurs négatives seront indiquées par une barre. Par définition, tous les indices sont simplifiés aux entiers les plus réduits possibles [4] :

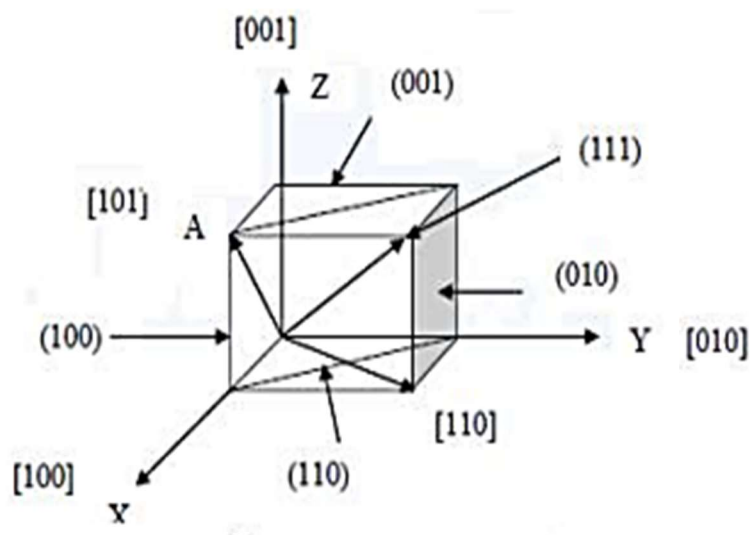


Figure 1.4. Directions cristallographiques [4].

Les orientations cristallines telles que [100], [110], [111] jouent un rôle crucial dans la fabrication des composants semiconducteurs. Ces directions affectent la vitesse de la croissance

cristalline, les caractéristiques mécaniques, et même la mobilité des porteurs de charge. Par exemple, les wafers de silicium sont souvent coupés selon la direction [100] afin d'optimiser l'efficacité des transistors.

1.6. Structure de bande : la base énergétique des semiconducteurs

La structure de bande indique la manière dont les niveaux d'énergie sont agencés à l'intérieur d'un cristal semiconducteur. Dans un matériau solide, les atomes se rapprochent l'un de l'autre au point que leurs niveaux d'énergie atomiques se combinent, créant ainsi des bandes d'énergie qui sont continues. Deux bandes en particulier revêtent une importance cruciale :

- **La bande de valence** : occupée par les électrons liés aux atomes.
- **La bande de conduction** : un espace où les électrons ont la capacité de circuler librement, permettant ainsi le passage de l'électricité.

Entre ces deux bandes, il existe une zone qu'on appelle le gap ou bande interdite, où l'absence d'état électronique est notable. La largeur de ce gap détermine si le matériau est un **conducteur**, un **isolant** ou un **semi-conducteur**. Dans les semiconducteurs, cette largeur est suffisamment réduite pour permettre à des électrons d'être excités par la chaleur ou la lumière et de franchir la bande de conduction.

1.7. Gap direct et indirect

L'énergie requise pour qu'un électron aille de la bande de valence à la bande de conduction est désignée par bande interdite. Si la transition se produit sans variation de la quantité de mouvement (momentum), on l'appelle gap direct (figure 1.5), comme c'est le cas pour le GaAs, qui est idéal pour générer de la lumière. En revanche, si un changement de momentum est nécessaire, souvent aidé par un phonon, cela correspond à un gap indirect, comme dans le silicium ce qui le rend moins efficace pour les usages optoélectroniques.

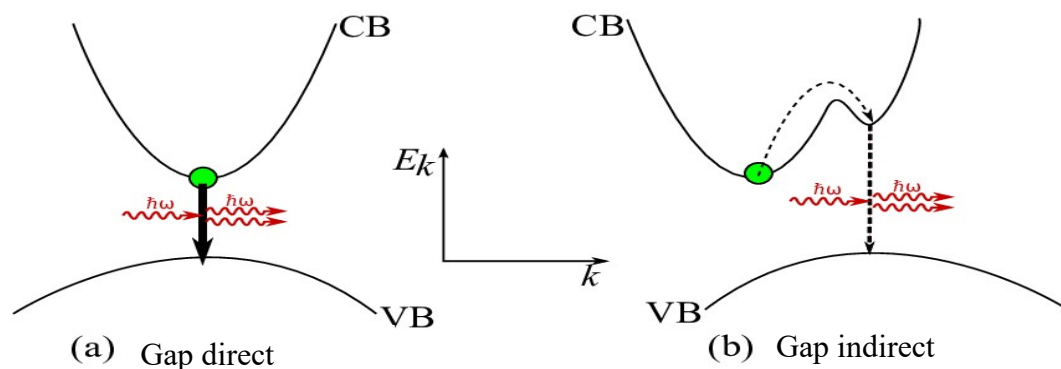


Figure 1.5. Gap direct et indirect.

1.8. Notion de trous et spin-orbite

Lorsqu'un électron s'échappe de la bande de valence, il génère un trou qui agit comme une particule chargée positivement et mobile. La bande de valence peut comporter de nombreuses sous-bandes, ce qui conduit à l'apparition de trous lourds (heavy hole, notés hh) ou légers (light hole, notés lh), en fonction de leur masse effective. L'approximation de la masse effective assimile la bande au voisinage de Γ à une parabole. Par définition, la masse effective $m_{\alpha\beta}^*$ est définie par l'expression, [5] :

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial E_{j,\vec{k}}}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \quad (1.1)$$

Où α et β sont deux directions indépendantes. $m_{\alpha\beta}^*$ est donc un tenseur.

De plus, il y a l'impact du spin-orbite (figure 1.6), résultant de l'interaction entre le spin de l'électron et son mouvement orbital autour du noyau. Cet impact améliore la structure de bande, affectant la dynamique des porteurs, surtout dans les matériaux contenant des atomes lourds.

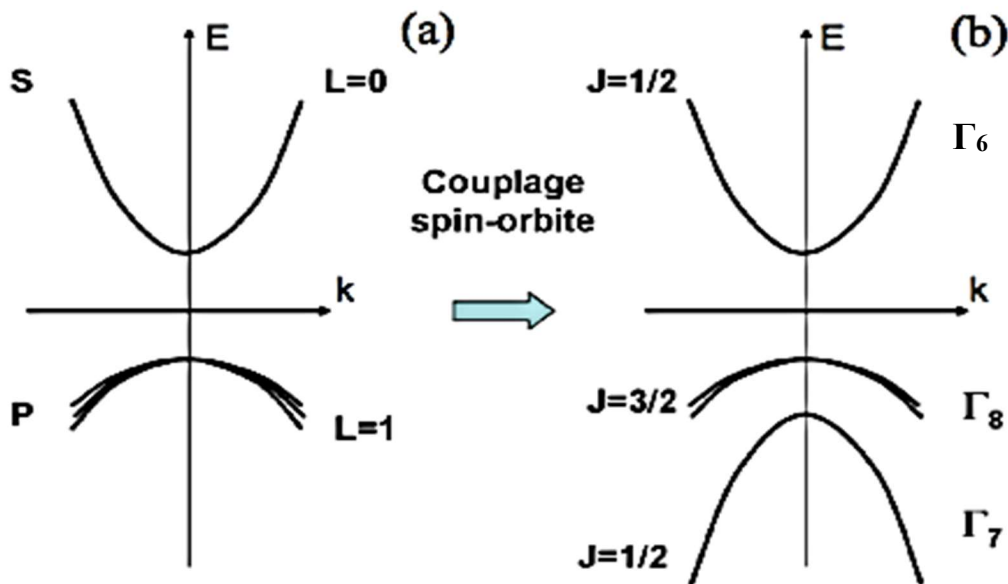


Figure 1.6. Impact du couplage spin-orbite sur la bande d'énergie d'un semiconducteur à bande interdite directe [6].

La première bande vide correspond à la bande antiliante de symétrie Γ_6 (type S). Il s'agit de la bande de conduction. Pour sa part, la bande de valence est trois fois dégénérée en raison de sa symétrie P. En l'absence de couplage spin-orbite (SO), les trois bandes P liantes sont toutes dégénérées au point Γ , qui est le centre de la première zone de Brillouin ($\vec{k} = \vec{0}$). Lorsque le couplage spin-orbite est introduit, cette dégénérescence est levée. Il émerge un quadruplet Γ_8 avec un moment cinétique total $J = 3/2$ ainsi qu'un doublet Γ_7 avec un moment $J = 1/2$, [6]. Le couplage SO entraîne un abaissement de l'énergie de la bande Γ_7 vers des niveaux énergétiques inférieurs tel qu'on peut voir sur la figure 1.6.

1.9. Les alliages

Cette technique nous donnera la possibilité de développer de nouveaux semiconducteurs avec des structures ternaires, quaternaires ou même plus complexes, en combinant de manière homogène deux ou plusieurs éléments de la même colonne du tableau périodique avec d'autres éléments d'une colonne différente dans le but d'améliorer les performances des dispositifs. À titre d'exemple, il serait possible de créer des alliages $In_xAl_{(1-x)}As$ ou $InAs_{(1-x)}P_x$ (voir tableau 1.1), afin de modifier certaines caractéristiques telles que la largeur du gap (pour des usages optoélectroniques) et la mobilité des porteurs (pour les applications électroniques).

Tableau 1.1. Les alliages ternaires et quaternaires.

Alliage	Structure	Forme Structure	Exemples
Ternaires	2 atomes sur l'un des mêmes colonnes	$BA_xA'_{(1-x)},$ $A_xA'_{(1-x)}B$	$GaAs_xP_{(1-x)}$ $In_xAl_{(1-x)}As$
Quaternaires 2+2	2 atomes de deux colonnes différentes	$A_xA'_{(1-x)}B_yB'_{(1-y)}$	$Ga_xIn_{(1-x)}As_yP_{(1-y)}$
Quaternaires 1+3	3 atomes de la même colonne et un de l'autre	$A_xA'_yA''_{(1-x-y)}B,$ $AA'_xA''_yB_{(1-x-y)}$	$Ga_xIn_yAl_{(1-x-y)}As,$ $GaN_xBi_yAs_{(1-x-y)}$

Où x et y désignent des coefficients stœchiométriques allant de 0 à 1, symbolisant les niveaux de concentration des éléments dans les divers alliages.

Les alliages offrent la possibilité de modifier avec précision les propriétés électroniques et optiques. Ces modifications obéissent souvent à la loi de Végard, qui stipule que les

caractéristiques d'un alliage varient de façon linéaire entre celles de ses constituants, en fonction de leur proportion.

Un alliage ternaire est composé de deux binaires, les divers paramètres (indiqués par Q dans l'équation 1.2) de ce matériau sont dérivés par interpolation linéaire selon la loi de Végard, [7].

$$Q(A_x A'_{(1-x)} B) = x \cdot Q(AB) + (1 - x) \cdot Q(A'B) \quad (1.2)$$

x représente la proportion de l'atome ajouté.

1.10. L'épitaxie

L'épitaxie est une technique de croissance de structures ou de couches minces semiconductrices sur un substrat cristallin en respectant sa structure atomique. Il existe deux types :

- ✓ Homoépitaxie : le substrat et le matériau sont du même type (GaAs/GaAs).
- ✓ Hétéroépitaxie : le substrat et le matériau sont de types différents (InGaAs/GaAs).

Elle est employée pour concevoir des éléments sophistiqués à l'échelle nanométrique, avec des couches parfaitement ordonnées (hétérostructures, puits quantiques, lasers). Plusieurs techniques d'épitaxie existent, notamment par faisceau moléculaire (MBE) ou par dépôt chimique en phase vapeur (CVD), etc.

Epitaxie en phase vapeur (VPE)

- Méthode modifiée de dépôt chimique en phase vapeur (CVD).
- Couches polycristallines indésirables.
- Taux de croissance : $\sim 2 \mu\text{m}/\text{min}$.

Epitaxie en phase liquide (LPE)

- Croître un cristal en projetant un liquide sur le substrat.
- Difficile de faire des films minces.
- Taux de croissance : $0.1\text{-}1 \mu\text{m}/\text{min}$.

Epitaxie par jets moléculaires (MBE)

- S'appuie sur la sublimation des éléments ultra purs, puis sur leur condensation sur plaquette.
- Dans une chambre à vide (pression : $\sim 10^{-11}$ Torr).
- « Faisceau » : les molécules ne s'arrêtent pas ni aux parois de la chambre ni aux atomes de gaz existants.
- Taux de croissance : $1 \mu\text{m/h}$.

1.11. La contrainte

Lorsqu'un semiconducteur est épitaxié sur un autre matériau, il est essentiel que ces deux matériaux partagent la même structure cristalline et que leurs paramètres de maille soient proches. Si les matériaux du substrat et de la couche active présentent des paramètres de mailles différents, le matériau qui constitue la couche la plus épaisse impose sa maille à l'autre matériau près de l'interface. Par conséquent, pour des couches assez minces, la maille du matériau épitaxié se déforme de façon élastique dans les deux sens.

La contrainte est un aspect qui est de plus en plus exploité en ingénierie des semi-conducteurs. Deux types principaux existent :

- Contrainte de compression : les atomes sont rapprochés, ce qui peut diminuer la mobilité des trous.
- Contrainte de tension : les atomes sont écartés, ce qui peut améliorer la mobilité des électrons.

Ces phénomènes sont employés pour améliorer la rapidité des transistors, notamment dans les technologies avancées comme FinFET et CMOS, en altérant légèrement les caractéristiques électroniques tout en maintenant la même composition chimique.

Dans le cas d'une contrainte biaxiale :

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_e} \quad (1.3)$$

a_e : paramètre de maille de la couche épitaxiée.

a_s : paramètre de maille du substrat.

Dans le cas d'une contrainte uniaxiale :

$$\varepsilon_{zz} = -2\varepsilon_{xx} \frac{c_{12}}{c_{11}} \quad (1.4)$$

C_{ij} : Coefficients d'élasticité

Le paramètre de maille de la couche épitaxiée ainsi que les coefficients d'élasticité sont déterminés en utilisant la loi de Végard qui stipule que la concentration fait varier le paramètre de manière linéaire.

La figure 1.7 montre l'influence de la contrainte sur le gap ainsi que sur la forme des bandes.

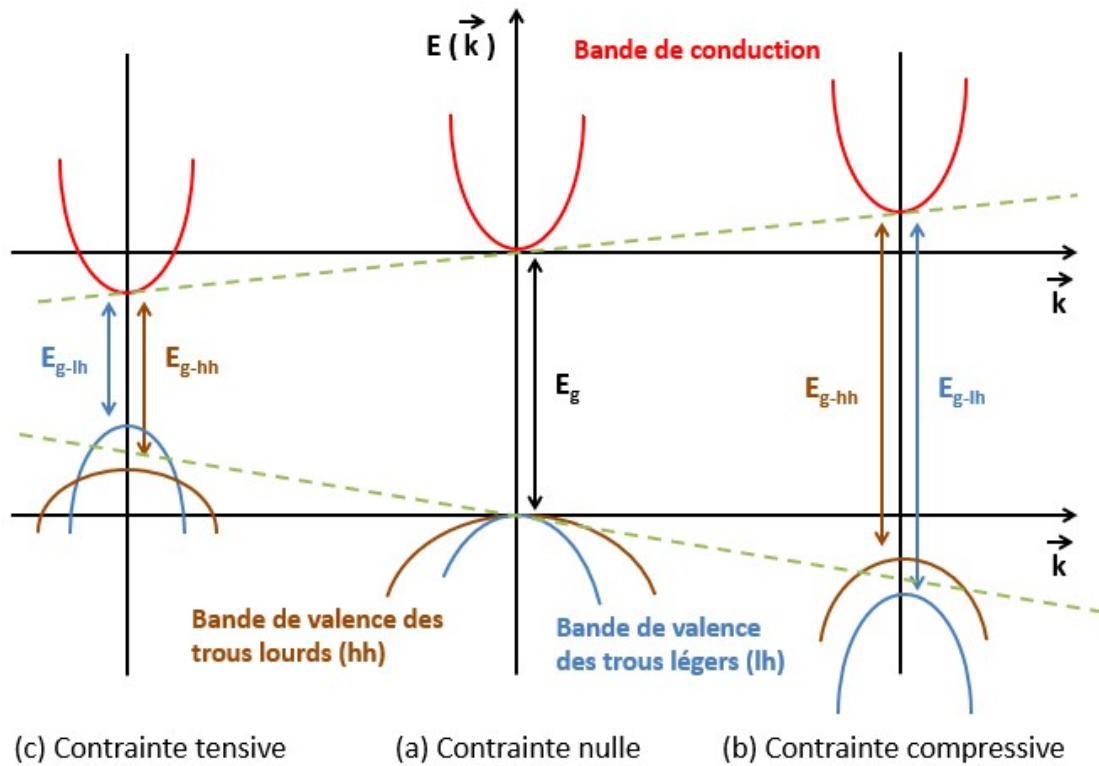


Figure 1.7. Effet de la contrainte sur la structure de bandes [8].

1.12. Les défauts cristallins

Dans un arrangement cristallin idéal chaque atome se situe à un emplacement spécifique au sein d'un agencement défini. Cependant, dans la réalité, les matériaux montrent souvent des défauts pouvant affecter leurs propriétés électriques et mécaniques. Ces défauts peuvent être classés de différentes manières, parmi lesquelles les plus communes incluent les défauts ponctuels et les dislocations.

a) Défauts ponctuels

Les défauts ponctuels représentent des irrégularités spécifiques au sein de la structure cristalline, influençant un ou plusieurs atomes.

Il existe plusieurs types de défauts ponctuels :

- ✚ Les défauts intrinsèques qui sont les défauts de la maille pour lesquels aucun atome n'a été incorporé ou enlevé.
- ✚ Les défauts extrinsèques représentent les défauts nécessitant le départ ou l'incorporation d'atomes. Ces défauts sont représentés sur la figure 1.8, ci-dessous.

Ces imperfections peuvent affecter les caractéristiques électriques, telles que la conductivité ou le dopage des matériaux semiconducteurs, et sont fréquemment exploitées pour optimiser les performances des appareils électroniques grâce à un dopage contrôlé.

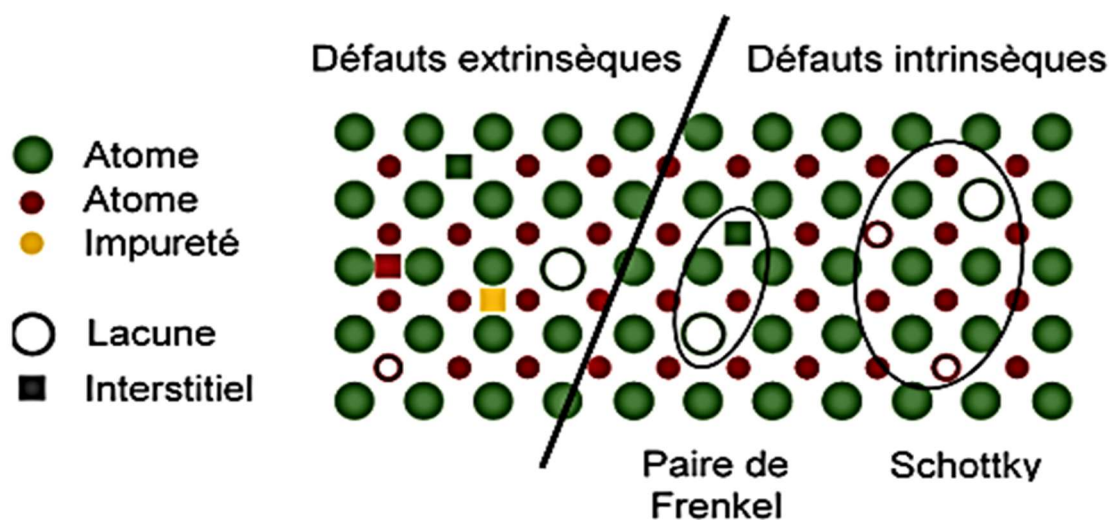


Figure 1.8. Différents types de défauts ponctuels [9].

b) Dislocations

Les dislocations sont des défauts linéaires qui se déplacent le long des plans atomiques dans le réseau cristallin (figure 1.9). Elles peuvent être classées en dislocations de coin ou dislocations vis. De tels défauts permettent une déformation plus facile car la majeure partie du cristal demeure inaltérée, [10]. Ces imperfections influencent la robustesse du matériau et peuvent avoir un impact sur la mobilité des porteurs de charge, ce qui est crucial dans des domaines exigeants comme les transistors à effet de champ.

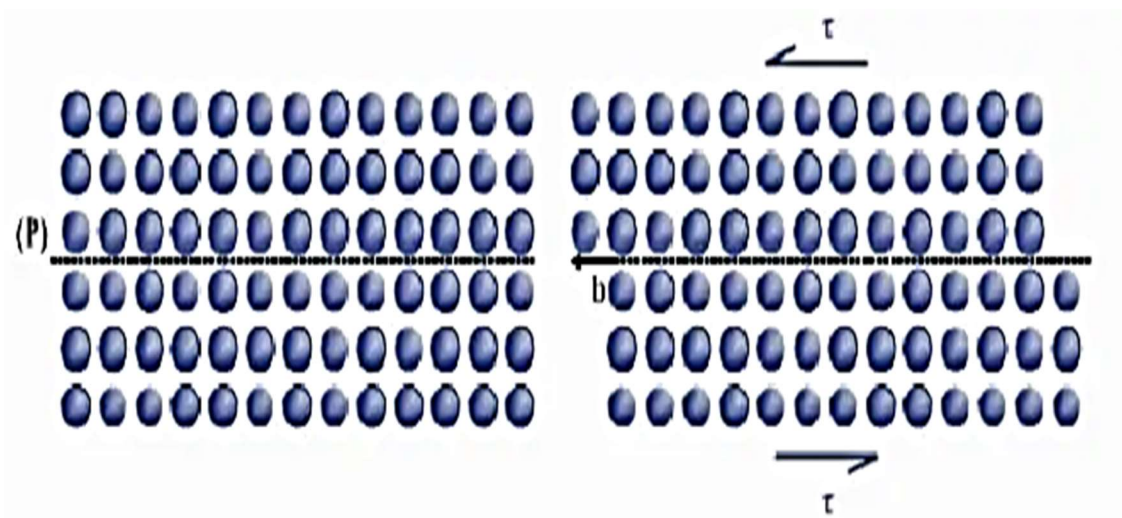


Figure 1.9. Glissement de plans atomiques [11].

1.13. Puits quantiques et niveaux énergétiques

Dans le domaine des semiconducteurs, un puits quantique peut être créé en superposant plusieurs couches planes de différents matériaux, par exemple un matériau ayant un faible gap entouré par un matériau ayant un gap plus élevé de chaque côté.

Dans cette situation, les électrons perçoivent un puits de potentiel rectangulaire avec une barrière d'une hauteur finie. L'évolution des puits quantiques a énormément bénéficié des avancées réalisées dans la culture des matériaux et ils sont principalement élaborés par l'épithaxie par faisceau moléculaire ou par dépôt chimique en phase vapeur. En modifiant la composition des matériaux, il sera possible de réaliser des structures d'une très grande complexité, comme c'est le cas des lasers à cascade quantique.

Une illustration des états énergétiques dans un puits quantique est présentée dans la figure 1.10.a. Cette illustration montre l'énergie de la barrière du matériau, celle du matériau confiné, ainsi que les barrières de potentiel pour les électrons et les trous. Les niveaux d'énergie accessibles pour les électrons et les trous sont indiqués par des lignes en pointillé.

La différence entre le niveau d'énergie le plus bas pour les électrons et le niveau d'énergie le plus élevé pour les trous constitue le gap du matériau confiné. Les énergies de ces états peuvent être déterminées en résolvant l'équation de Schrödinger (équation 1.5).

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e^*} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E_n \psi(x) \quad (1.5)$$

Où : m_e^* est la masse effective des porteurs, V est le potentiel énergétique, E est l'énergie totale de l'électron, ψ c'est la fonction d'onde et $\hbar = h/2\pi$, où h la constante de Planck.

Dans le cas classique d'une particule dans un puits quantique à barrière infinie, les niveaux d'énergie confinés se présentent comme suit :

Les énergies propres sont donc quantifiées :

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{n\pi}{L_p} \right)^2 \quad (1.6)$$

Et les fonctions propres sont :

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L_p}} \cos\left(\frac{n\pi}{L_p} x\right), & \text{si } n \text{ est impair} \\ \sqrt{\frac{2}{L_p}} \sin\left(\frac{n\pi}{L_p} x\right), & \text{si } n \text{ est pair} \end{cases} \quad (1.7)$$

Où E_n est l'énergie du $n^{\text{ème}}$ niveau confiné, $\hbar$ est la constante de Planck réduite, m_e^* est la masse effective des porteurs considérés et L_p est la largeur du puits quantique.

Les fonctions d'ondes correspondant à ces énergies, obtenues en appliquant les conditions de raccordement des fonctions d'ondes et de leurs dérivées ($1/m^* \frac{d\psi}{dz}$ qui doivent être continues aux interfaces $z=0$ et $z=L$ sont représentées dans la figures 1.10.b.

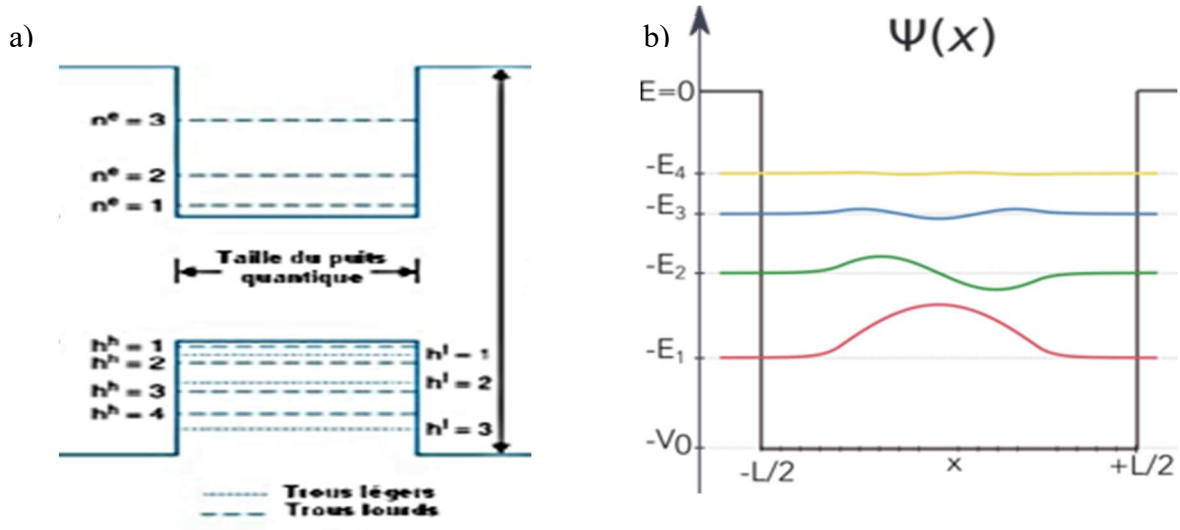


Figure 1.10. a) Niveaux d'énergie d'un puits quantique de largeur L, b) fonction d'ondes.

1.14. Les décalages de bandes ΔE_c et ΔE_v

Les décalages d'énergie ΔE_c et ΔE_v font référence aux différences d'énergie entre les bandes de conduction et les bandes de valence au sein des matériaux hétérogènes ou de structures composées. Ces décalages peuvent entraîner des répercussions majeures sur la recombinaison des porteurs de charge, la mobilité des électrons ainsi que sur les propriétés optiques des matériaux.

Par exemple, dans le cas des hétérostructures, les décalages ΔE_c (dans la bande de conduction) et ΔE_v (dans la bande de valence) modifient les propriétés de l'interface, affectant ainsi la transportabilité des charges et l'efficacité des dispositifs fabriqués à partir de ces matériaux.

Les décalages des bandes dans un puits quantique (voir figure 1.11) sont donnés par les équations (1.8) et (1.9).

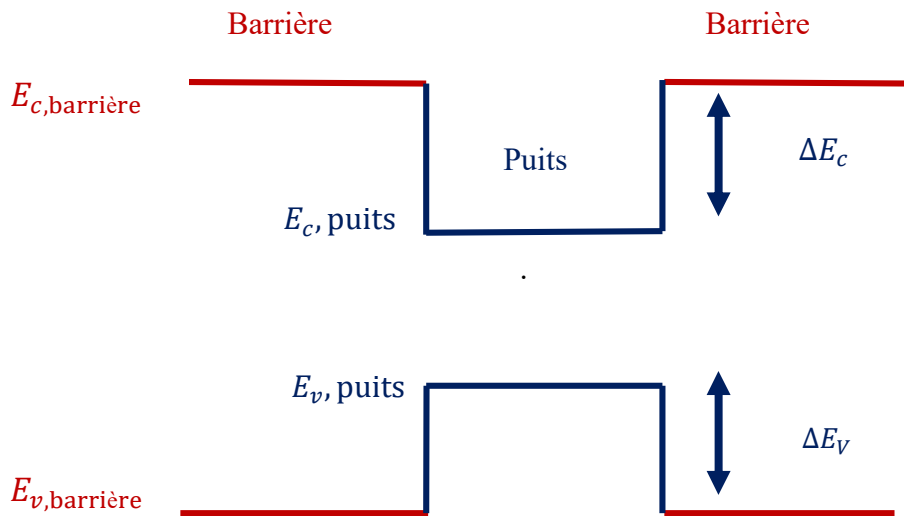


Figure 1.11. Décalages de bandes ΔE_c et ΔE_v .

$$\Delta E_c = E_{c,barrière} - E_{c,puits} \quad (1.8)$$

$$\Delta E_v = E_{v,barrière} - E_{v,puits} \quad (1.9)$$

1.15. Taux de confinement

Ce paramètre indique la quantité des porteurs (trous et électrons) confinés dans la bande de conduction et la bande de valence, respectivement. Il est déterminé par les équations suivantes :

$$Q_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_c + \Delta E_v} \quad (1.10)$$

$$Q_v = \frac{\Delta E_v}{\Delta E_c + \Delta E_v} \quad (1.11)$$

1.16. Spectre électromagnétique et domaines d'applications

Le spectre électromagnétique englobe tout l'ensemble des ondes électromagnétiques, classées par leur longueur d'onde et leur fréquence. Il comprend les ondes radio, les micro-ondes, les infrarouges, la lumière visible, les rayons ultraviolets, les rayons X et les rayons gamma (figure 1.12).

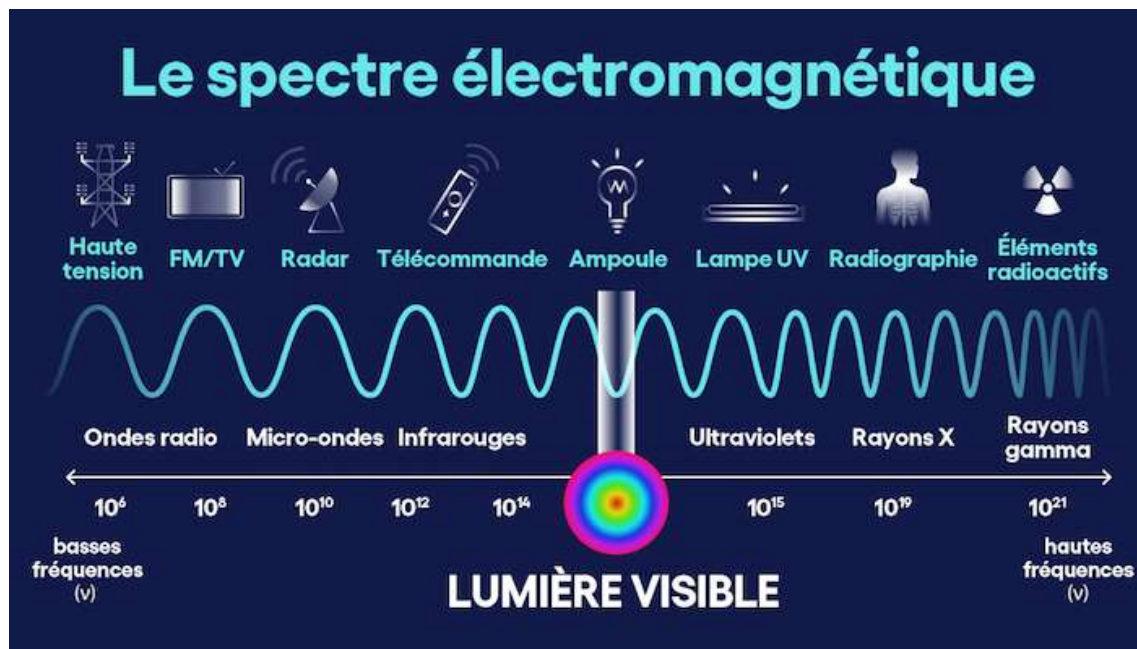


Figure 1.12. Le spectre électromagnétique.

En commençant par les ondes les plus puissantes, nous pouvons identifier successivement :

-  Les rayons gamma (γ) : ceux-ci proviennent des radiations émises par les éléments radioactifs. Étant très puissants, ils pénètrent aisément la matière et représentent un réel danger pour les cellules vivantes. Leur longueur d'onde varie d'un centième de milliardième (10^{-14} m) à un milliardième (10^{-12} m) de millimètre, [13].
-  Les rayons X : ces radiations très puissantes peuvent traverser plus ou moins facilement les objets matériels et sont légèrement moins nocifs que les rayons gamma. Ils trouvent des applications en médecine pour réaliser des radiographies, dans le domaine industriel pour inspecter les bagages dans les transports aériens, et dans la recherche pour analyser la matière (rayonnement synchrotron). Les rayons X possèdent des longueurs d'onde allant d'un milliardième (10^{-12} m) à un cent millième (10^{-8} m) de millimètre, [14].
-  Les rayons ultraviolets : ces rayonnements, qui possèdent une énergie relativement élevée, peuvent être nuisibles pour la peau. Fort heureusement, la plupart des ultraviolets sont absorbés par l'ozone de l'atmosphère, qui agit comme un rempart protecteur pour nos cellules. Leurs longueurs d'onde varient d'un centième de millimètre (10^{-8} m) à quatre dixièmes de millimètre ($4 \cdot 10^{-7}$ m).
-  Le spectre visible : cela représente la très petite portion de l'électromagnétisme que notre œil peut détecter. C'est au sein du spectre visible que la lumière solaire atteint son intensité maximale ($0,5 \mu\text{m}$) et c'est également ici que l'on peut observer l'éventail complet des teintes de l'arc-en-ciel, s'étendant du bleu au rouge. Il s'étend de quatre dixièmes de millimètre ($4 \cdot 10^{-7}$ m) - pour la lumière bleue - jusqu'à huit dixièmes de millimètre ($8 \cdot 10^{-7}$ m) - pour la lumière rouge.
-  Les infrarouges : ce sont les rayonnements émis par tous les objets dont la température est supérieure au zéro absolu. En télédétection, certaines bandes de l'infrarouge sont utilisées pour évaluer la température des surfaces de la Terre, des océans et des nuages. La plage infrarouge englobe des longueurs d'onde allant de huit dixièmes de millimètre ($8 \cdot 10^{-7}$ m) à un millimètre (10^{-3} m). Ce domaine est divisé en trois régions : le proche infrarouge (NIR), l'infrarouge moyen (MIR) et l'infrarouge lointain (FIR).

📺 Les ondes radar ou hyperfréquences : Cette section du spectre est employée pour évaluer le rayonnement émis par la surface de la Terre, semblable à la télédétection utilisant l'infrarouge thermique, mais elle inclut également des capteurs actifs tels que les systèmes radar. Un capteur radar génère un rayonnement électromagnétique et en examinant le signal réfléchi, il permet de retrouver et d'identifier des objets, tout en mesurant leur vitesse de déplacement s'ils sont en mouvement. La gamme des hyperfréquences couvre des longueurs d'onde allant d'environ un centimètre jusqu'à un mètre.

📺 Les ondes radio : Cette plage de longueurs d'onde est la plus étendue au sein du spectre électromagnétique et concerne les vagues possédant les fréquences les plus faibles. Elle s'étend d'une longueur d'onde de quelques centimètres à plusieurs kilomètres. Relativement simples à émettre et à recevoir, les ondes radio sont utilisées pour transmettre de l'information (radio, télévision et téléphone). La bande FM des radios correspond à des longueurs d'onde d'environ un mètre. Celles utilisées pour les téléphones mobiles sont d'environ 10 centimètres.

1.17. Le gain optique

Le gain d'un matériau par unité de longueur est défini par le taux de croissance de la densité de photons pendant leurs propagations suivant une direction dans le cristal, [12].

$$g(h\nu) = \sum_n \sum_m \left(\frac{q^2 h}{2m_0^2 \varepsilon_0 n_r} \right) \left(\frac{1}{h\nu} \right) |M(E_{i,j})|^2 D_r(E_{i,j})(f_j - f_i) \quad (1.12)$$

ε_0 : La permittivité du vide.

m_0 : La masse effective de l'électron dans le vide.

n_r : Indice de réfraction.

M : L'élément de la matrice optique du dipôle.

f_i et f_j : Sont les fonctions de fermi des Fermi Dirac pour les bandes de conduction et de valence obtenues par l'équation :

$$f_{i,j} = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_{i,j} - E_f}{kT}}} \quad (1.13)$$

Où $E_{i,j}$ est l'énergie de l'état, E_f est le niveau de Fermi, k est la constante de Boltzmann et T est la température.

1.18. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons fourni un aperçu des caractéristiques des matériaux semi-conducteurs. Nous avons expliqué certains éléments essentiels qui illustrent la structure de bande de ce type de matériaux. Nous avons exploré l'impact de la contrainte sur la structure de bande, ce qui influe également sur les niveaux d'énergie des bandes de conduction et de valence. De plus, nous avons présenté le modèle d'Al et Asada pour estimer le gain optique, qui repose sur l'hypothèse que toutes les sous-bandes possèdent une forme parabolique.

Chapitre 2. Résultats et discussions

2.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous allons mener une analyse théorique sur les caractéristiques optoélectroniques de la structure à puits quantique InGaAsSb/InGaSb.

Dans la première section, nous allons analyser de quelle manière les proportions des éléments qui composent les matériaux de puits et de barrière influencent divers paramètres tels que : le paramètre de maille, la largeur de bande interdite (gap), les masses effectives des différents porteurs ainsi que d'autres facteurs. Dans une seconde section, nous étudierons l'impact de ces concentrations sur le gain optique.

2.2. Structure à étudier

La figure 2.1 montre un schéma de la structure que nous allons simuler dans cette étude. La configuration du puits quantique repose sur un alliage quaternaire nommé InGaAsSb, où les atomes d'Indium (In) et de gallium (Ga) proviennent de la colonne III du tableau périodique, tandis que les atomes d'antimoine (Sb) et d'arsenic (As) viennent de la colonne V. Cet alliage est déposé sur une base, qui constitue le substrat, en InGaSb.

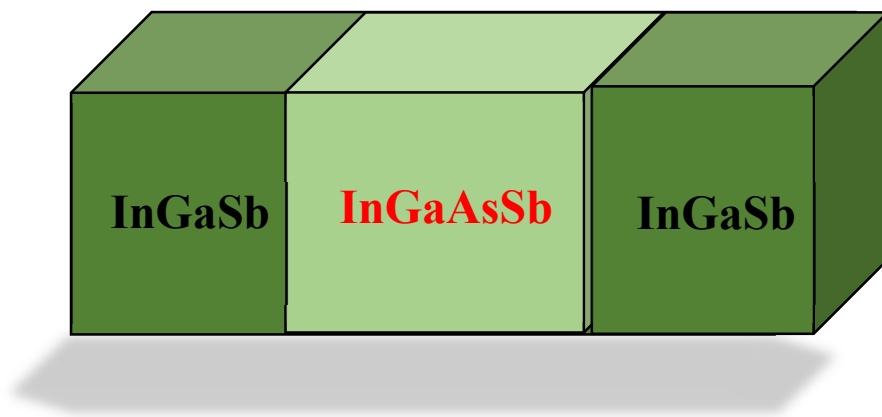


Figure 2.1. Illustration de la structure à puits quantique InGaAsSb/InGaSb.

2.3. Paramètre de maille

Le paramètre de maille pour l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ sera déterminé selon la loi d'interpolation de Végard. Il sera défini par l'expression suivante :

$$a = x(1 - y)a(\text{InSb}) + y(1 - x)a(\text{GaAs}) + (1 - x)(1 - y)a(\text{GaSb}) + xya(\text{InAs}) \quad (2.1)$$

Le tableau 2.1 résume les valeurs des paramètres de maille des quatre binaires qui constituent l'alliage quaternaire InGaAsSb : InAs, GaSb, GaAs et InSb.

Tableau 2.1. Valeurs des paramètres de maille [7].

Paramètre	InAs	GaSb	GaAs	InSb
de maille (Å)	6.0583	6.09593	5.5633	6.47937

La figure 2.2, montre comment le paramètre de maille de l'alliage quaternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ change selon les teneurs en indium (In) et en arsenic (As). En ce qui concerne la figure 2.3, elle démontre le changement de la concentration d'indium dans le substrat InGaSb.

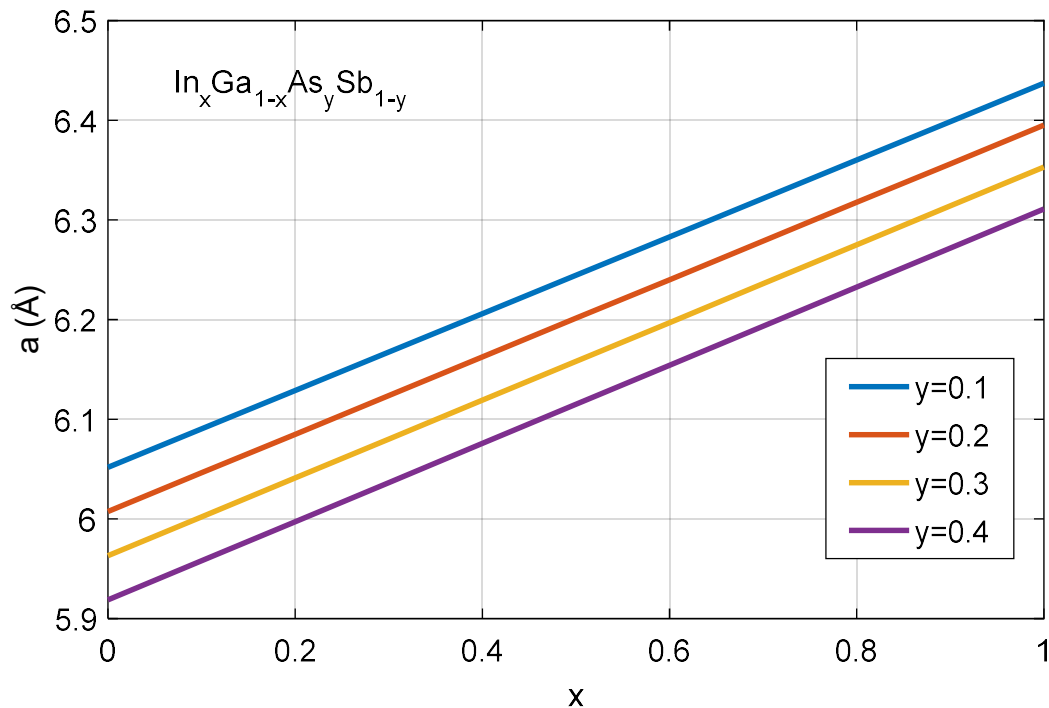


Figure 2.2. Variation du paramètre de maille en fonction de la concentration d'In et d'As de l'alliage InGaAsSb,

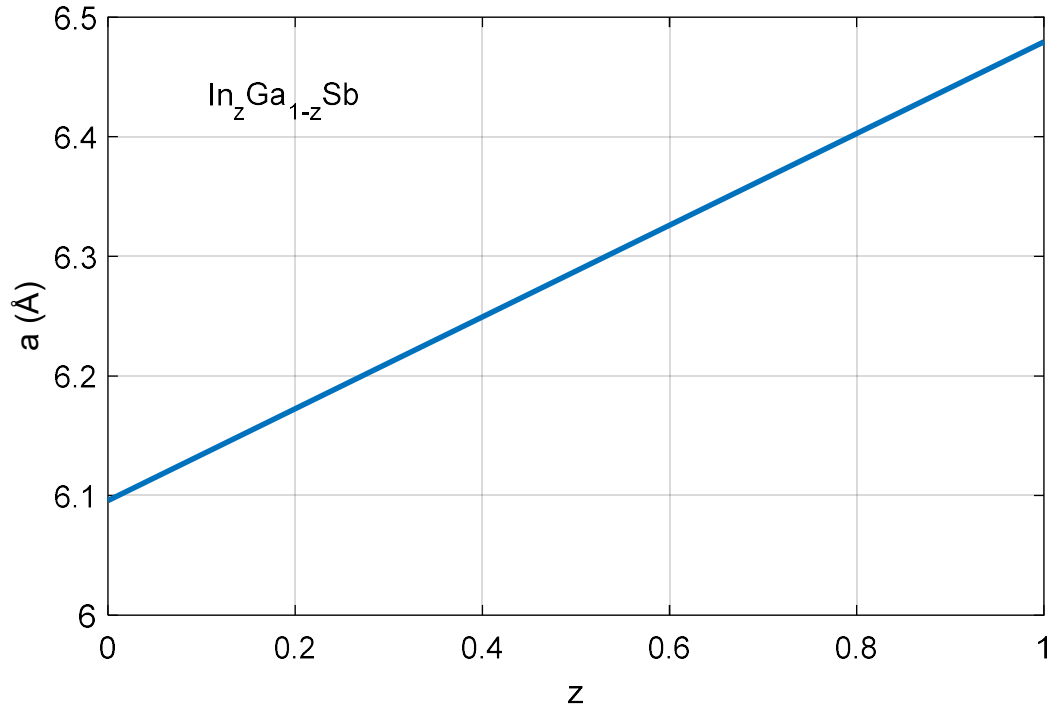


Figure 2.3 Variation du paramètre de maille de la barrière en fonction de la concentration d'In.

On observe que le paramètre de maille s'accroît avec l'augmentation de la concentration d'indium et d'antimoine. L'augmentation de la concentration d'indium conduit à une élévation de la valeur du paramètre de maille de ce matériau.

2.4. Contrainte

La différence entre les paramètres de maille du matériau puits $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ et la barrière InGaSb engendre des contraintes. Les impacts des contraintes sont extrêmement précieux, car l'emploi d'hétérostructures contraintes permettra d'adapter la longueur d'onde d'émission en modifiant les niveaux d'énergie des différentes bandes.

Les figures 2.4 et 2.5 montrent la variation de la contrainte en fonction de la concentration en indium et en arsenic pour deux valeurs différentes de la concentration d'In dans la barrière InGaSb qui sont 0.2 et 0.3, respectivement. Les deux figures montrent que l'augmentation de la concentration d'In dans le matériau puits entraîne une réduction de la contrainte dans la structure, alors que celle en As augmente cette dernière. L'incorporation d'In dans la barrière provoque également une élévation de la contrainte dans cette configuration.

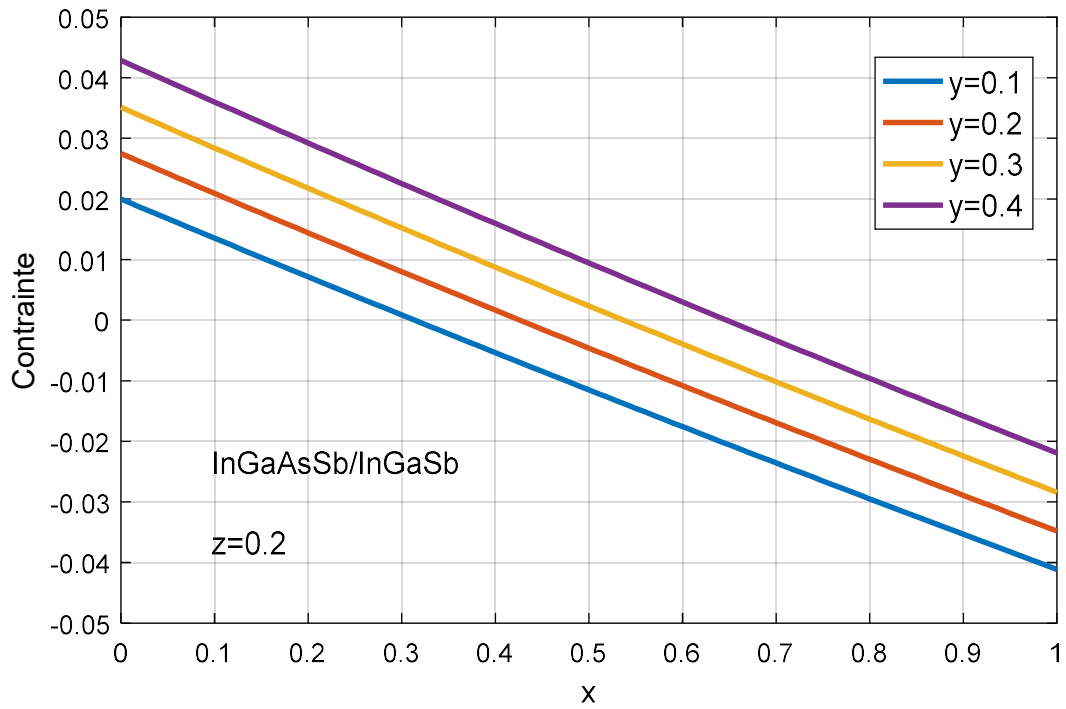


Figure 2.4. Variation de la contrainte en fonction d'In et d'As pour une valeur d'In dans le substrat de 0.2.

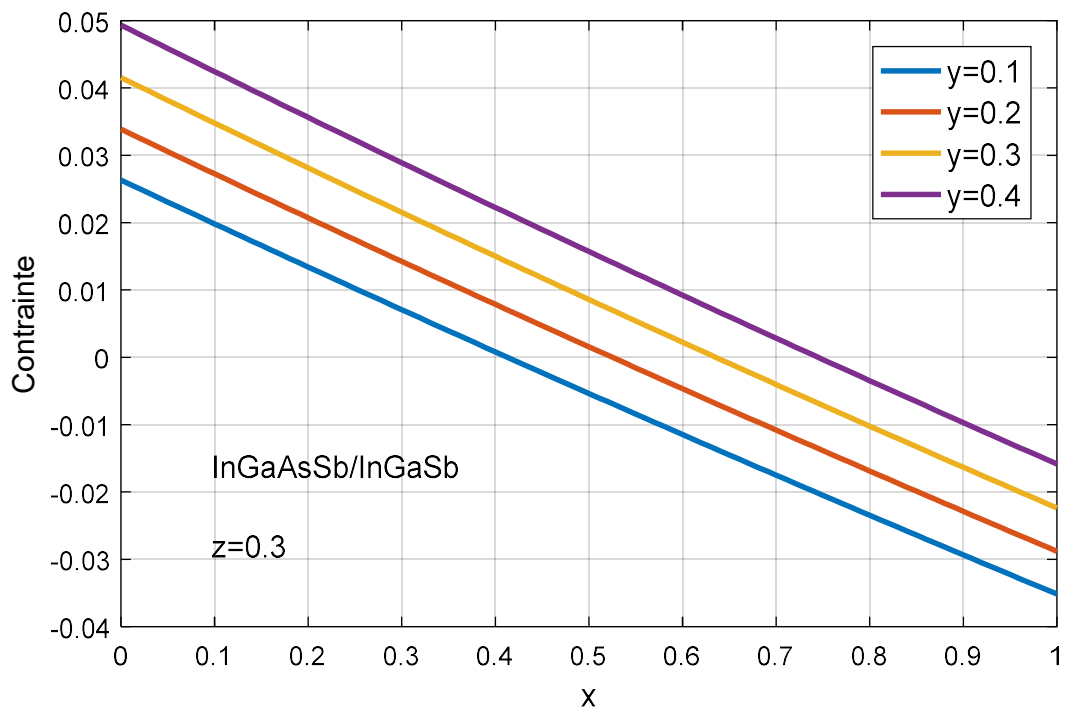


Figure 2.5. Variation de la contrainte en fonction d'In et d'As pour une valeur d'In dans le substrat de 0.3.

Le type de la contrainte dépend de la manière dont les concentrations sont combinées. Par exemple, pour $(x=0.2, y=0.2, z=0.2)$, la structure subira une relaxation sous tension d'un niveau de 6.68%. Dans le cas de la combinaison $(x=0.9, y=0.4, z=0.2)$, la contrainte est de type compression avec une valeur de 0.23%.

Les deux matériaux peuvent présenter un ajustement de maille en augmentant la valeur de z . Par exemple, on pourrait admettre la combinaison $(x=0.95, y=0.4, z=0.3)$ afin d'avoir une structure adaptée.

2.5. Energie Spin-orbite

Les figures 2.6 et 2.7 illustrent l'évolution de l'énergie spin-orbite de l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ et de la barrière InGaSb en fonction des concentrations de leurs compositions. Cette énergie est calculée à partir de la loi de Végard.

Il est observé que l'énergie due au spin-orbite diminue lorsqu'il y a une augmentation des teneurs en indium et en arsenic. Concernant la barrière, une variation de la concentration en indium provoque une réduction de l'énergie spin-orbite du substrat.

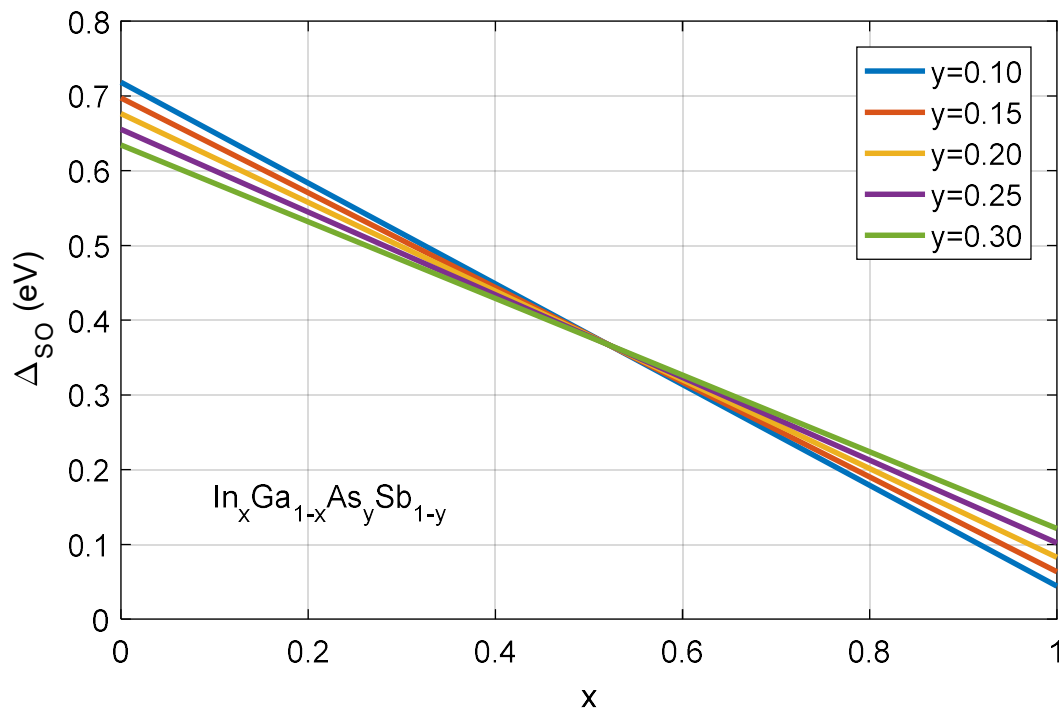


Figure 2.6. Variation de l'énergie spin-orbite en fonction d'In et d'As dans l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$.

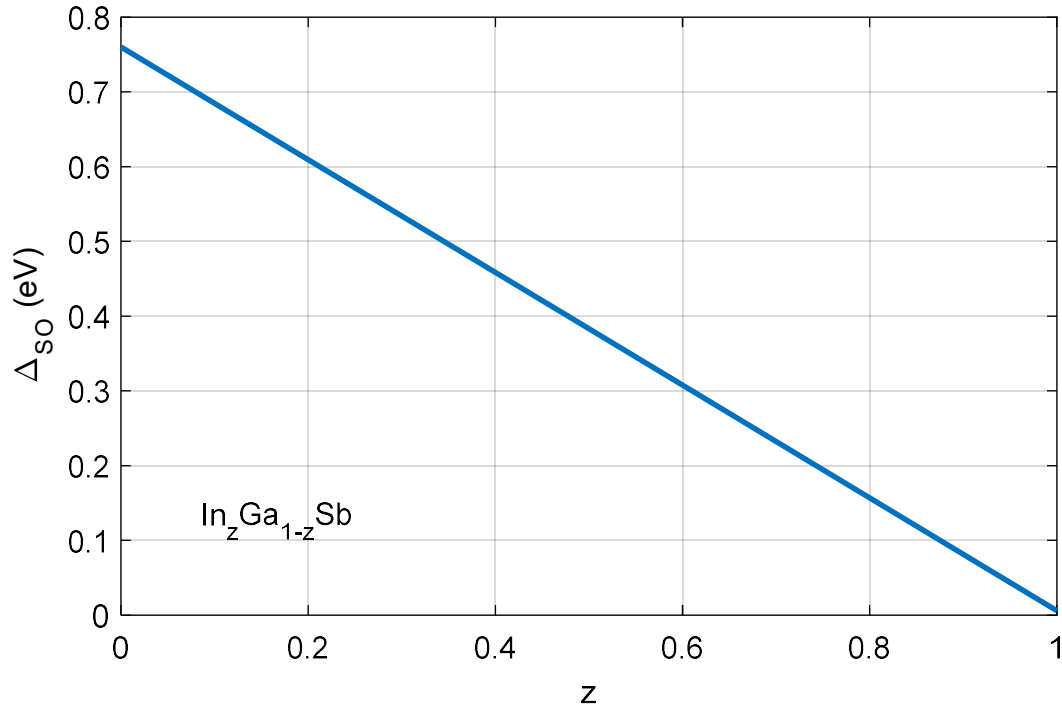


Figure 2.7. Variation de l'énergie spin-orbite en fonction d'In dans l'alliage $\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{Sb}$.

2.6. Energie de la bande interdite

L'énergie de la bande interdite du quaternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ et celle de la barrière $\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{Sb}$ peuvent se modéliser à l'aide de la loi de Végard, tout en ajoutant le terme correctif (facteur de Bowing).

$$E_g = x(1-y)E_g(\text{InSb}) + y(1-x)E_g(\text{GaAs}) + (1-x)(1-y)E_g(\text{GaSb}) + xyE_g(\text{InAs}) + C \quad (2.2)$$

$$C = x(1-x)[yC(\text{InGaAs}) + (1-y)C(\text{InGaSb})] + y(1-y)[(1-x)C(\text{GaAsSb}) + xC(\text{InAsSb})] \quad (2.3)$$

$$E'_g = zE_g(\text{InSb}) + (1-z)E_g(\text{GaSb}) + z(1-z)C(\text{InGaSb}) \quad (2.4)$$

Les tableaux 2.2 et 2.3 présentent, respectivement, les valeurs des énergies des zones interdites des alliages InAs, InSb, GaAs et GaSb, ainsi que les valeurs du coefficient de Bowing pour les compositions ternaires InAsSb, GaAsSb, InGaAs et InGaSb, qui ont été employées dans le calcul.

Tableau 2.2. Energie de gap des matériaux [7].

	InAs	InSb	GaAs	GaSb
E_g (eV)	0.359	0.17	1.43	0.72

Tableau 2.3. Paramètres de Bowing des matériaux ternaires [7]

	InAsSb	GaAsSb	InGaAs	InGaSb
C (eV)	-0.6	-1.25	-0.58	-0.415

Les illustrations 2.8 et 2.9 présentent la fluctuation de l'énergie de la bande interdite de l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ en fonction de la proportion d'indium pour différentes teneurs en arsenic, ainsi que celle de l'alliage $\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{Sb}$ en fonction de son taux d'indium, respectivement. Il est clair que l'énergie des gaps s'atténue à mesure que la concentration de toutes les teneurs augmente.

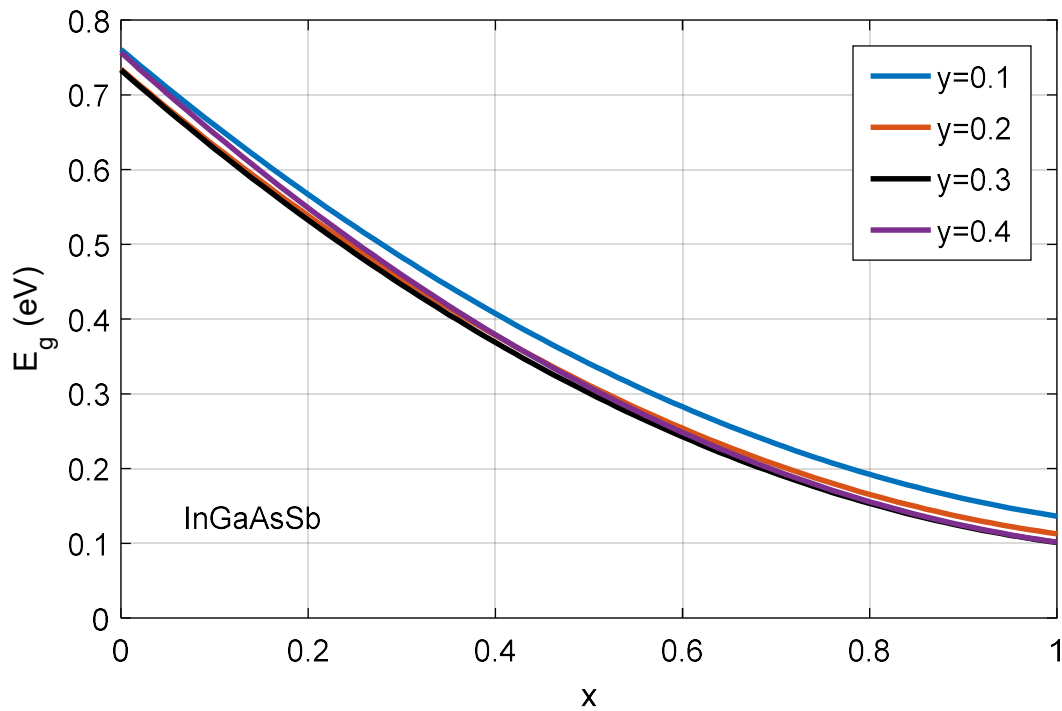


Figure 2.8. Evolution de l'énergie du gap en fonction des concentrations d'indium et d'arsenic pour l'alliage InGaAsSb.

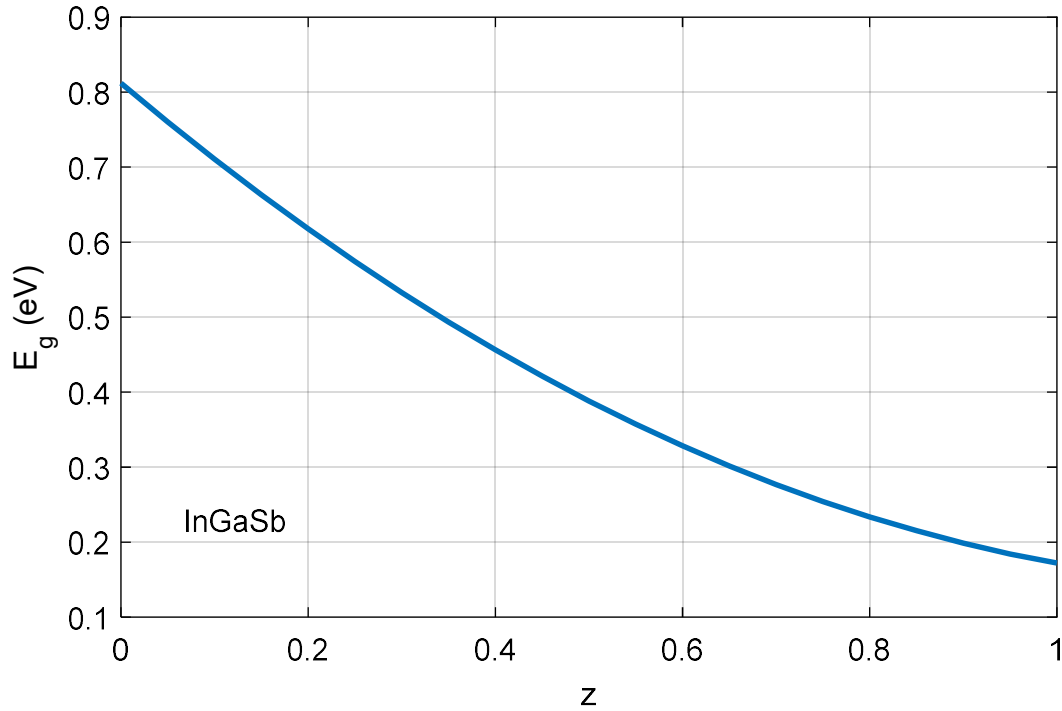


Figure 2.9. Evolution de l'énergie du gap en fonction de la concentration d'indium pour l'alliage InGaSb.

2.7. Effet de la température sur l'énergie de gap

Pour décrire la variation du gap en fonction de la température, on utilise souvent la loi de Varshni qui s'écrit :

$$E_g(T) = E_g(0K) - \frac{A.T^2}{B+T} \quad (2.5)$$

A et B sont les paramètres empiriques de Varshni [5].

Les figures 2.10 et 2.11 illustrent la variation de l'énergie de la bande interdite de l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}$ en fonction de la température pour différentes proportions d'indium et d'arsenic, respectivement. L'effet de la température sur le gap du matériau substrat est illustré dans la figure 2.12. L'énergie de la bande interdite diminue avec la température suivant une courbe quadratique. La diminution de E_g à mesure que T augmente est due à l'expansion thermique, qui modifie la position de la bande de valence et de la bande de conduction et les interactions électron-phonon, qui provoquent des changements dans les positions relatives des bandes de valence et de conduction. C'est ce phénomène qui contribue le plus à la variation de température de E_g .

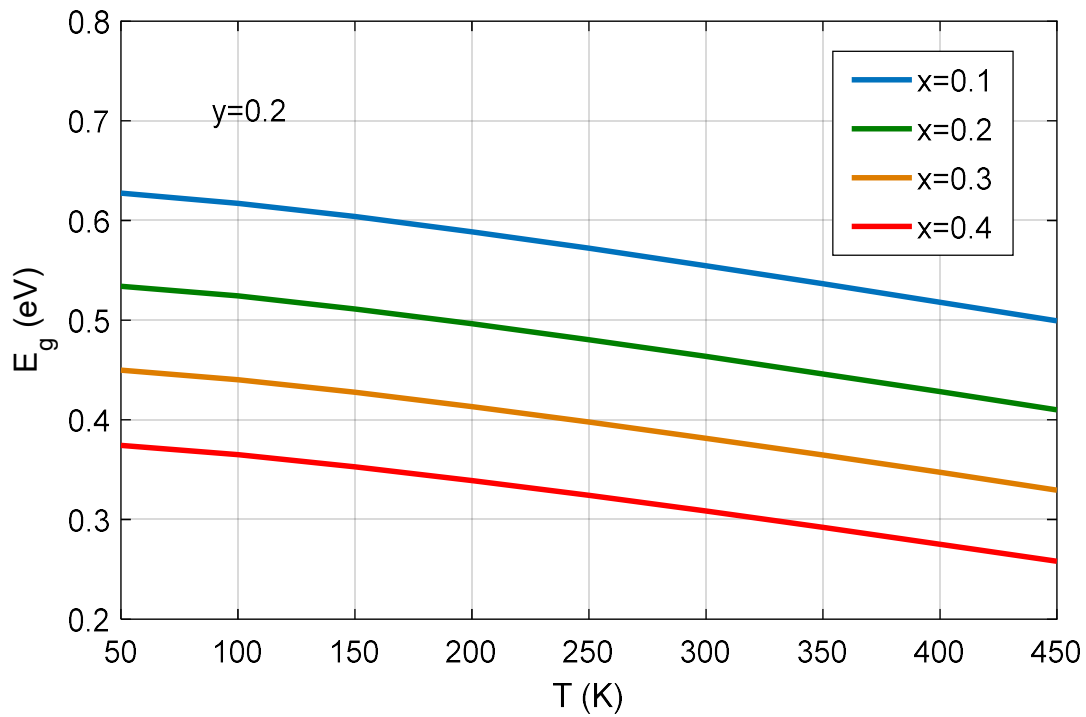


Figure 2.10. Variation de l'énergie de gap en fonction de T pour plusieurs concentrations en indium.

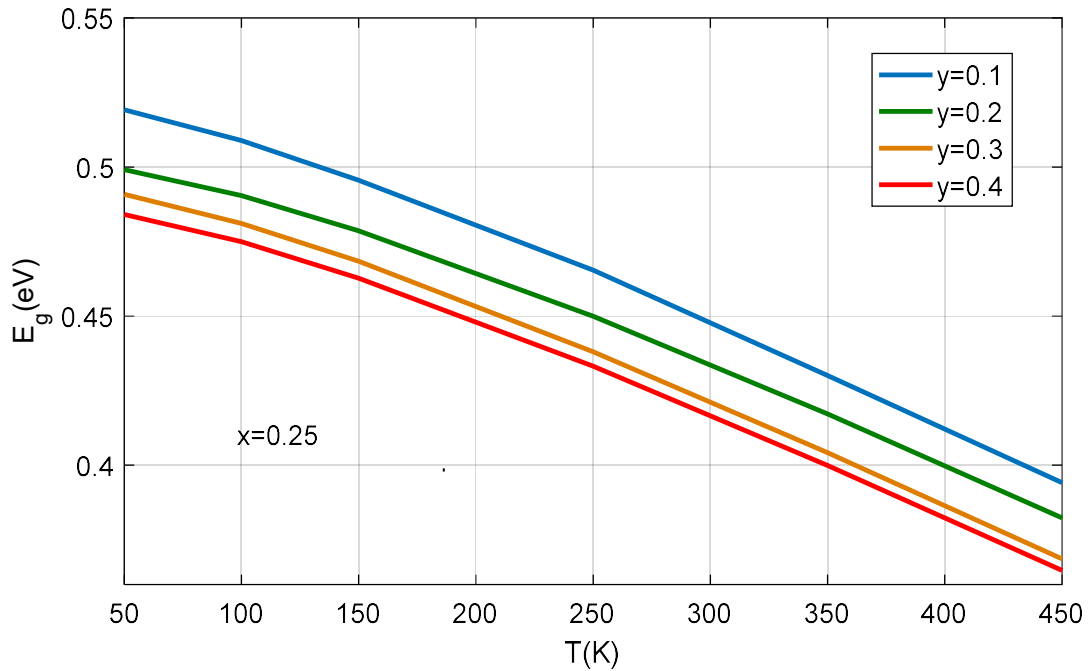


Figure 2.11. Variation de l'énergie de gap en fonction de T pour plusieurs concentrations en arsenic.

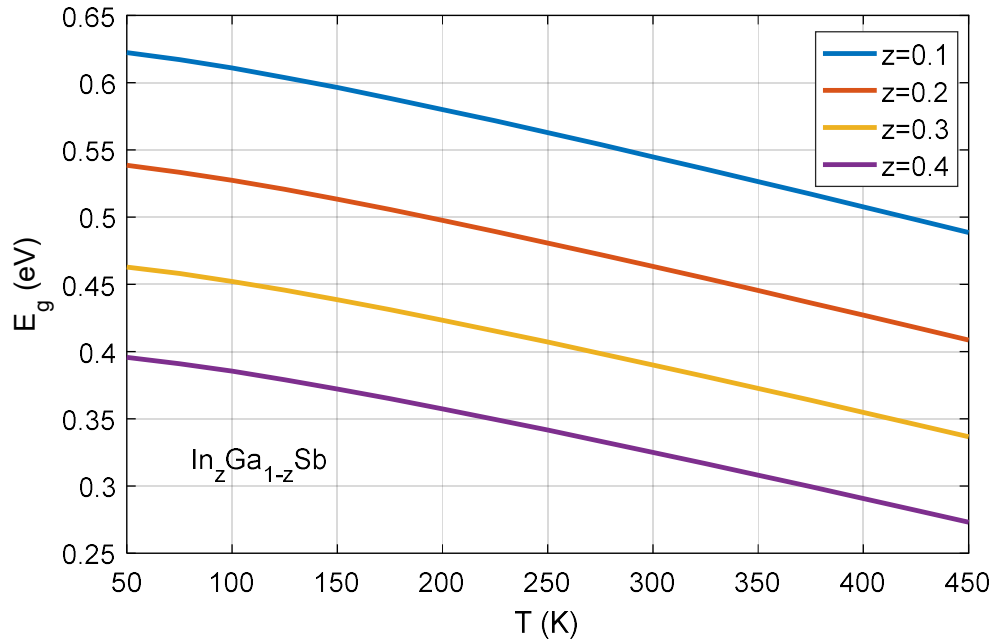


Figure 2.12. Variation de E_g (T) pour plusieurs concentrations en In dans le substrat.

2.8. Masse effective des différents porteurs de charge

Les figures 2.13 et 2.14 indiquent que les masses effectives des divers porteurs de charge ϵ , hh, lh et SO diminuent lorsque la concentration en indium augmente, ce qui signifie que la mobilité de l'ensemble de ces particules augmentera et c'est l'inverse pour l'effet de l'arsenic sur les masses.

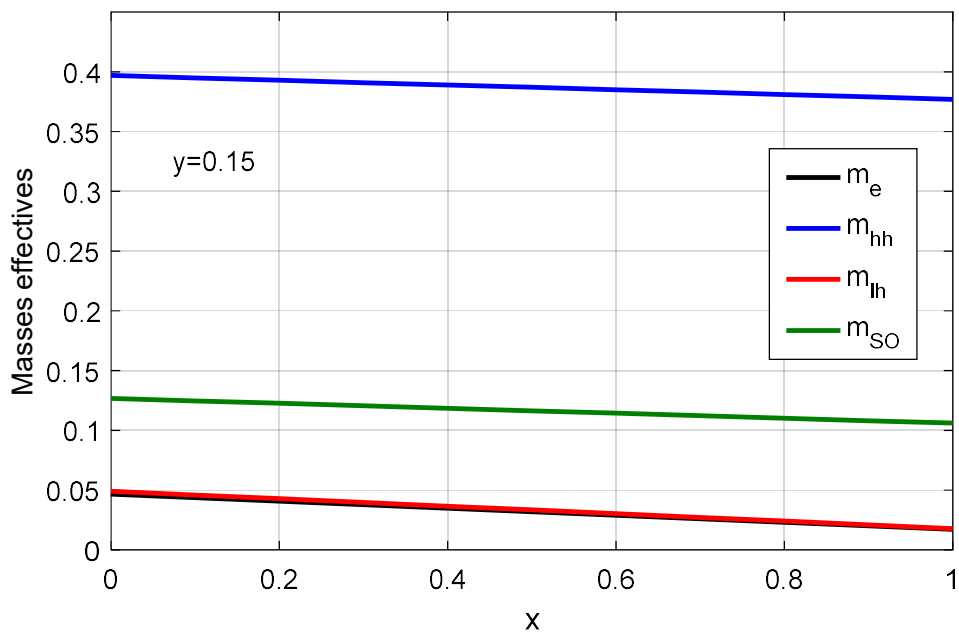


Figure 2.13. Masse effectives en fonction des concentrations d'In dans le puits.

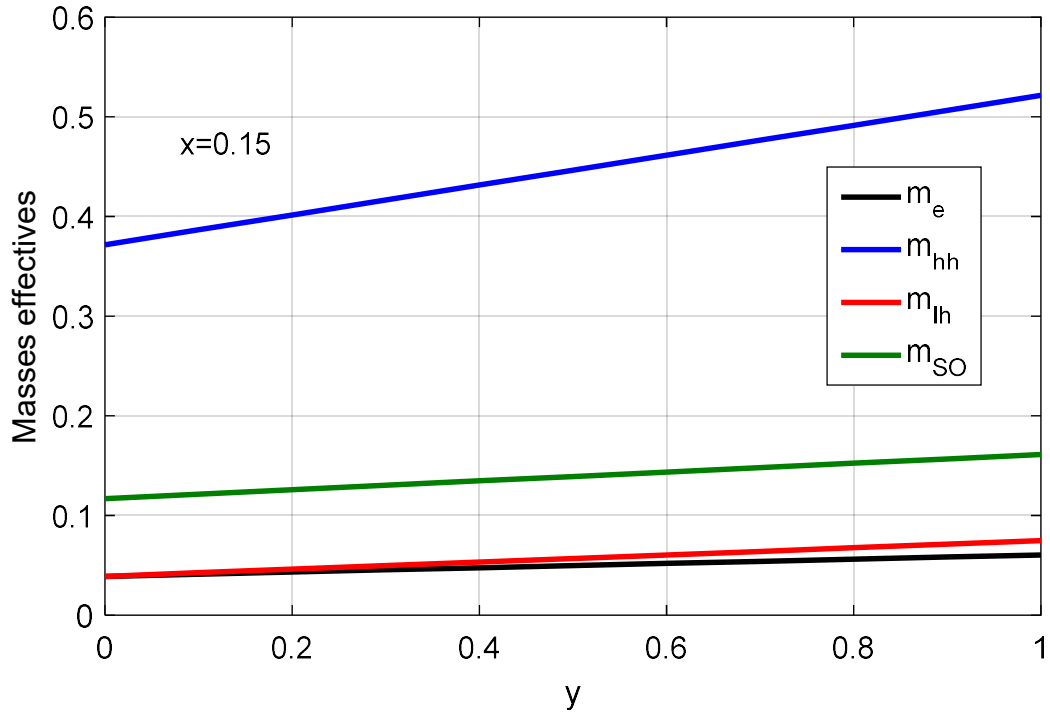


Figure 2.14. Masses effectives en fonction des concentrations d'As dans le puits.

La figure 2.15 montre que la masse effective des porteurs de charge lourds augmente à mesure que la proportion d'indium dans le substrat s'accroît, tandis que la masse des porteurs légers, ainsi que celle des électrons et des interactions spin-orbite, diminue, ce qui a un impact sur la mobilité de ces porteurs.

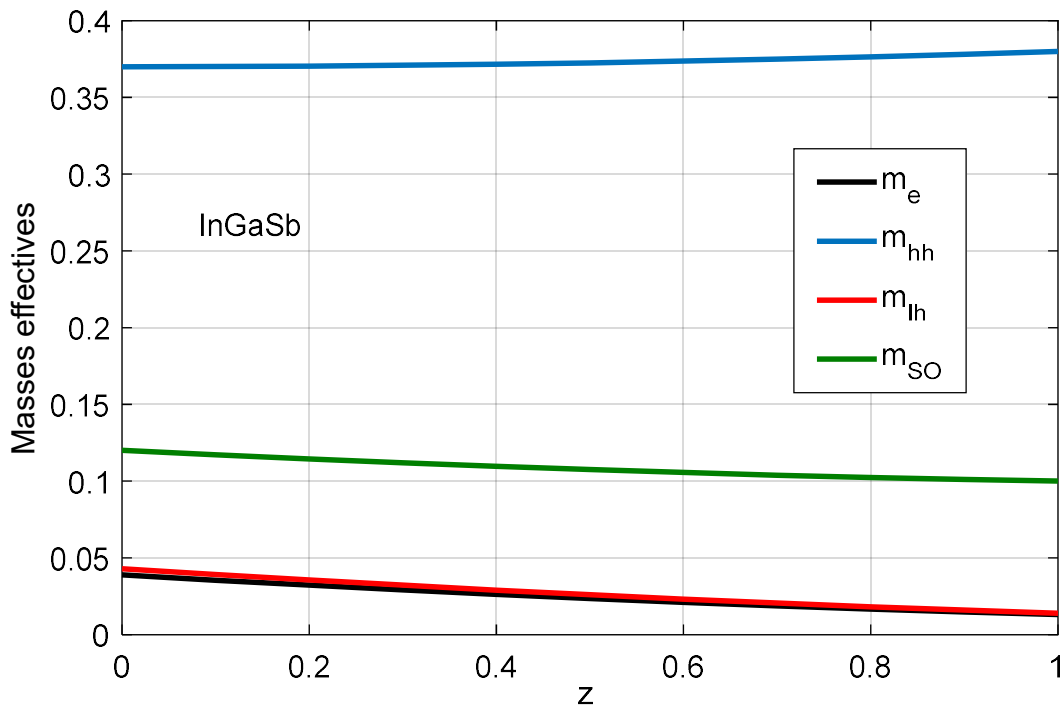


Figure 2.15. Masse effective en fonction des concentrations d'In dans la barrière.

2.9. Décalage des bandes ΔE_c et ΔE_v

Les illustrations 2.16 et 2.17, illustrent le changement du décalage de la bande de conduction entre le matériau puits et celui de la barrière en relation avec la concentration d'In qui varie selon plusieurs niveaux d'As pour les deux configurations $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Sb}$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{Sb}$, respectivement. L'introduction d'indium et d'arsenic entraîne une augmentation du décalage ΔE_c , ce qui résulte en l'émergence d'un puits de conduction profond. En revanche, l'incorporation d'indium dans le matériau de barrière réduit la valeur de ce décalage. Pour la configuration $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Sb}$, on a un $\Delta E_c=0.472\text{eV}$, tandis que pour la configuration $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}/\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{Sb}$, le décalage devient $\Delta E_c=0.387\text{ eV}$. Les illustrations 2.18 et 2.19 montrent comment le décalage de la bande de valence évolue entre le matériau du puits et celui de la barrière en fonction de la concentration d'In, qui varie selon plusieurs niveaux d'As pour les deux configurations $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Sb}$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{Sb}$, respectivement. Il est observé que l'incorporation d'In entraîne une augmentation de la valeur de ΔE_v , mais lorsque la concentration d'As dépasse 0.3, le décalage ΔE_v commence à se réduire. En revanche, l'incorporation d'indium dans le matériau de barrière réduit la valeur de ce décalage. Pour la configuration $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Sb}$, on a un $\Delta E_v=0.226\text{ eV}$, tandis que pour la configuration $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}/\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{Sb}$, le décalage devient $\Delta E_v=0.202\text{ eV}$.

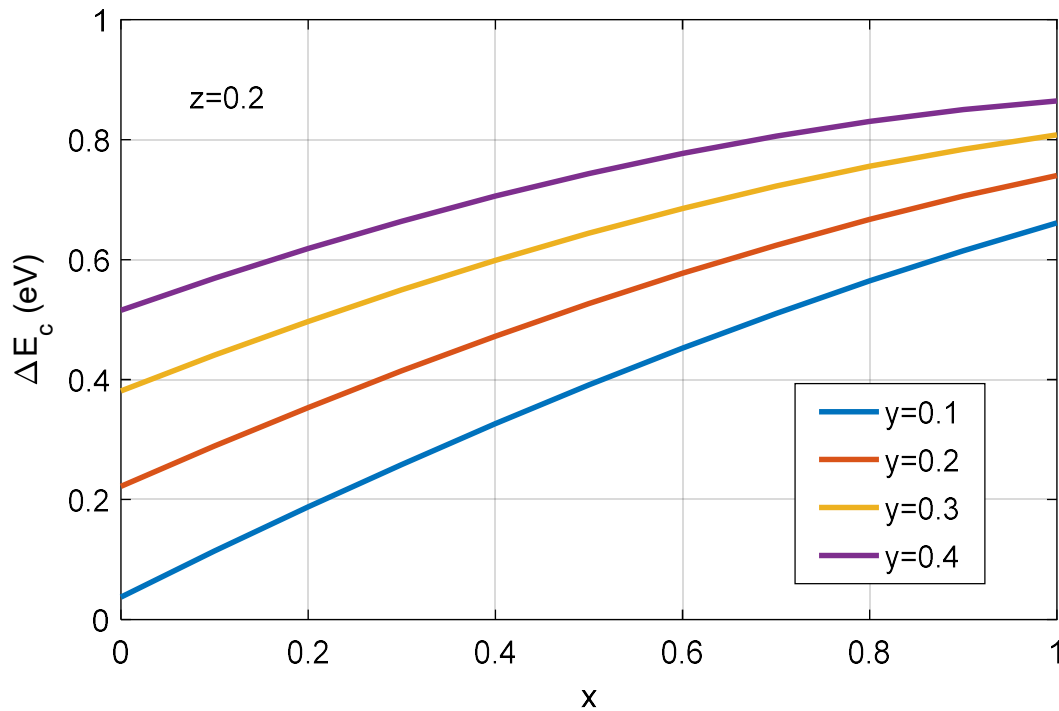


Figure 2.16. Variation de ΔE_c en fonction de x de la structure $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Sb}$.

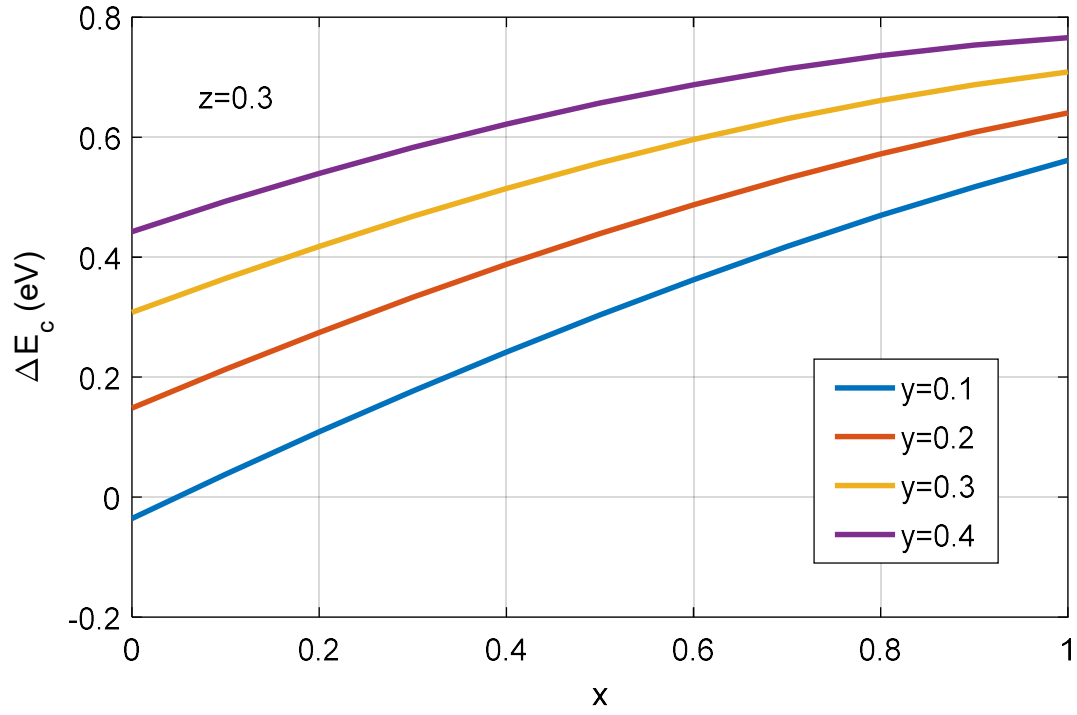


Figure 2.17. Variation de ΔE_c en fonction de x de la structure $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{Sb}$.

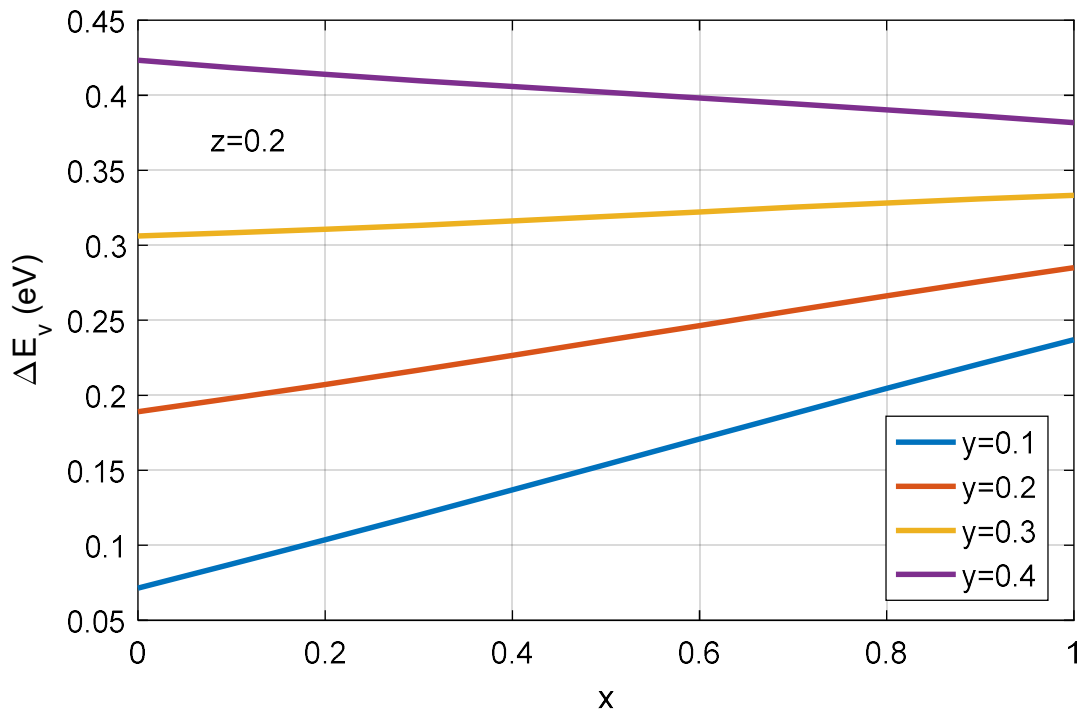


Figure 2.18. Variation de ΔE_v en fonction de x de la structure $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Sb}$.

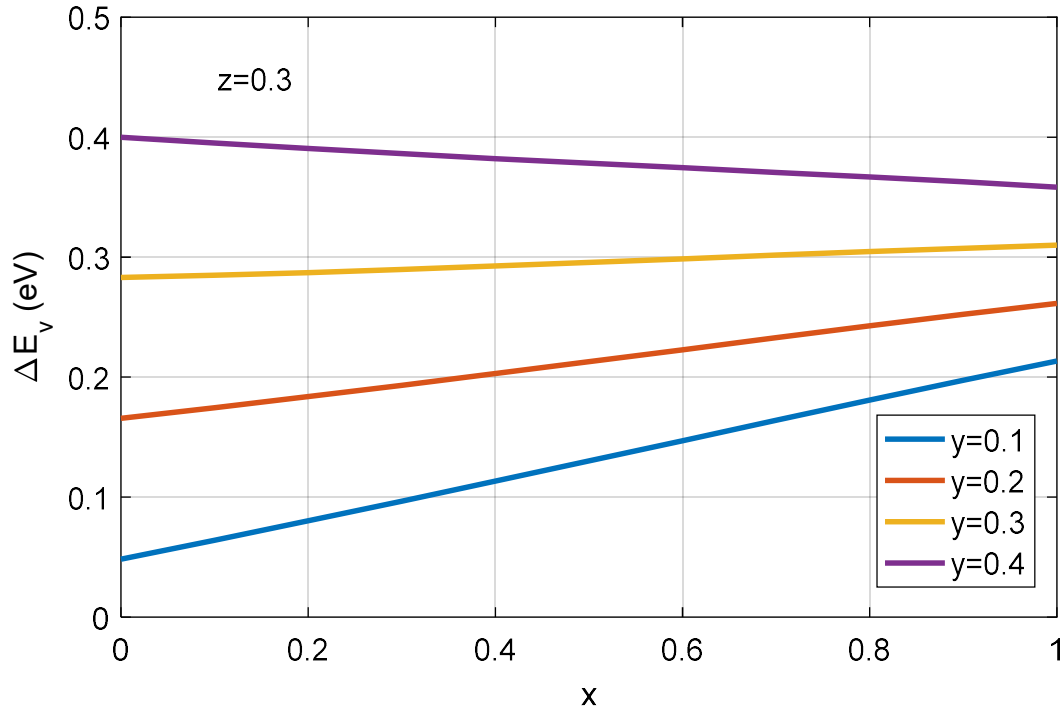


Figure 2.19. Variation de ΔE_v en fonction de x de la structure $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{Sb}$.

2.10. Gain optique

Les figures 2.20, 2.21 et 2.22 illustrent comment le coefficient de gain optique varie selon la longueur d'onde d'émission pour différentes concentrations d'indium dans la configuration à puits quantique $\text{InGaAsSb}/\text{InGaSb}$ pour les ensembles de concentrations (y, z) : $(0.2, 0.2)$, $(0.4, 0.2)$ et $(0.4, 0.3)$, respectivement.

En se basant sur ces données, il est évident que l'élévation de toute les teneurs, entraîne une baisse du coefficient de gain optique et entraîne un décalage de la longueur d'onde associée vers des valeurs plus étendues dans le domaine des infrarouges.

L'augmentation des niveaux de concentrations d'In et d'As dans le matériau InGaAsSb formant le puits a un impact significatif sur la réduction du maximum du coefficient de gain optique et sur le déplacement de la longueur d'onde associée. D'un autre côté, l'introduction d'In dans la barrière InGaSb affecte beaucoup plus le déplacement de la longueur d'onde d'émission.

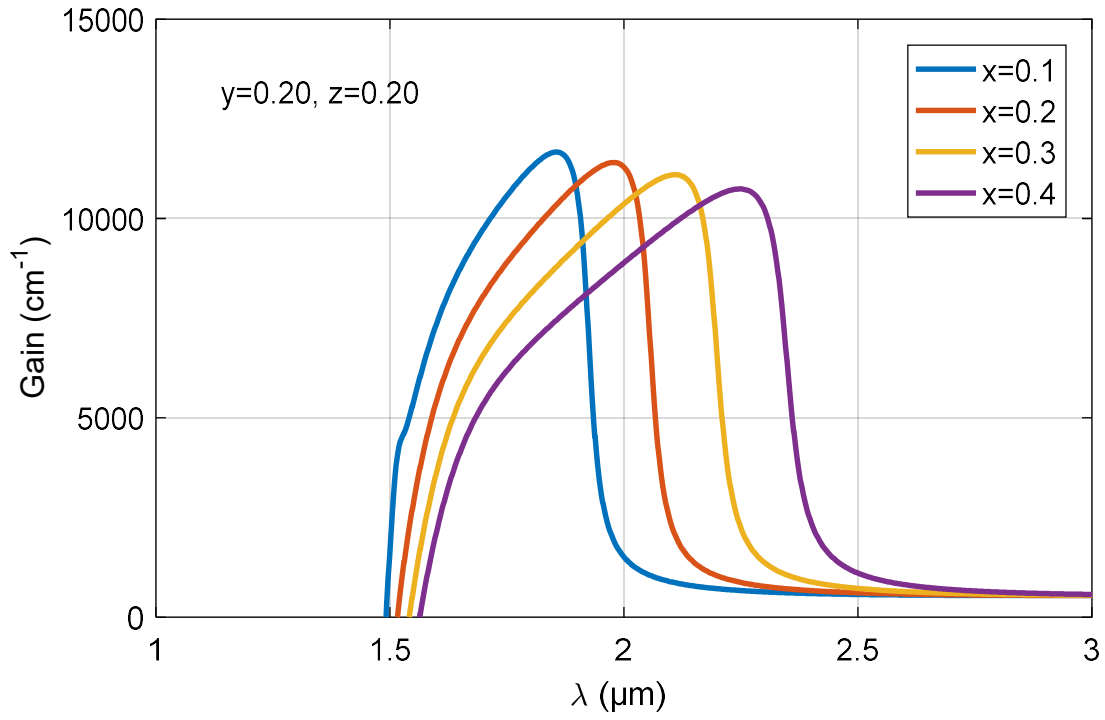


Figure 2.20. Variation du gain en fonction de λ pour différentes concentrations d'In, ($y=0.2$ et $z=0.2$).

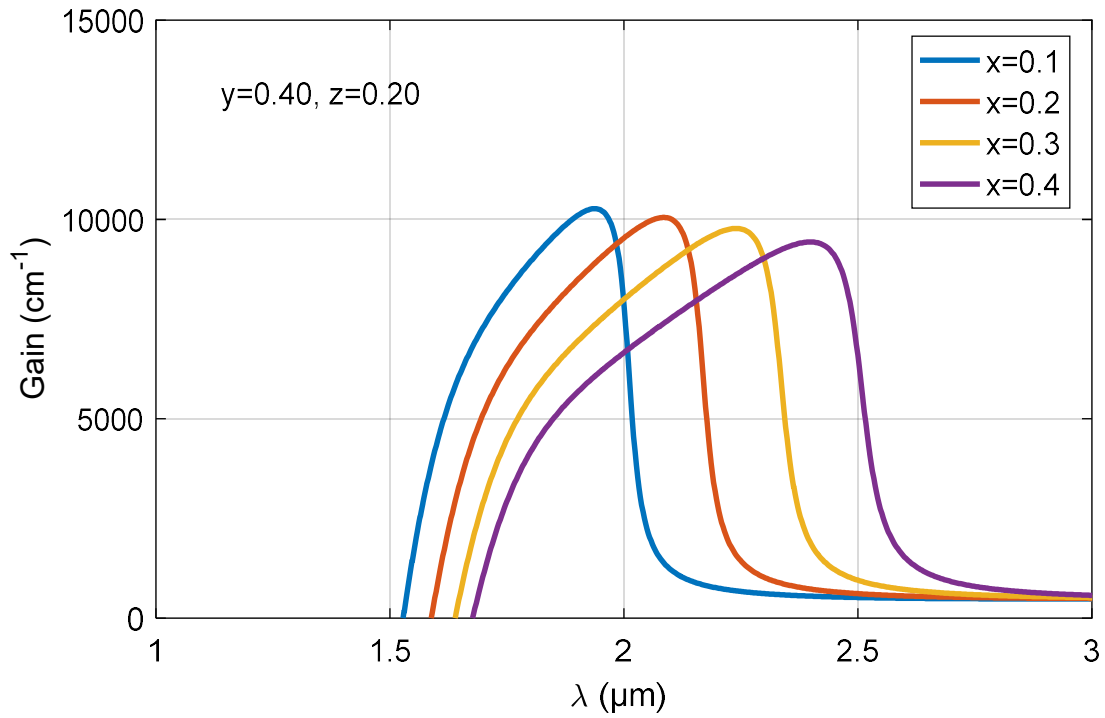


Figure 2.21. Variation du gain en fonction de λ pour différentes concentrations d'In, ($y=0.4$ et $z=0.2$).

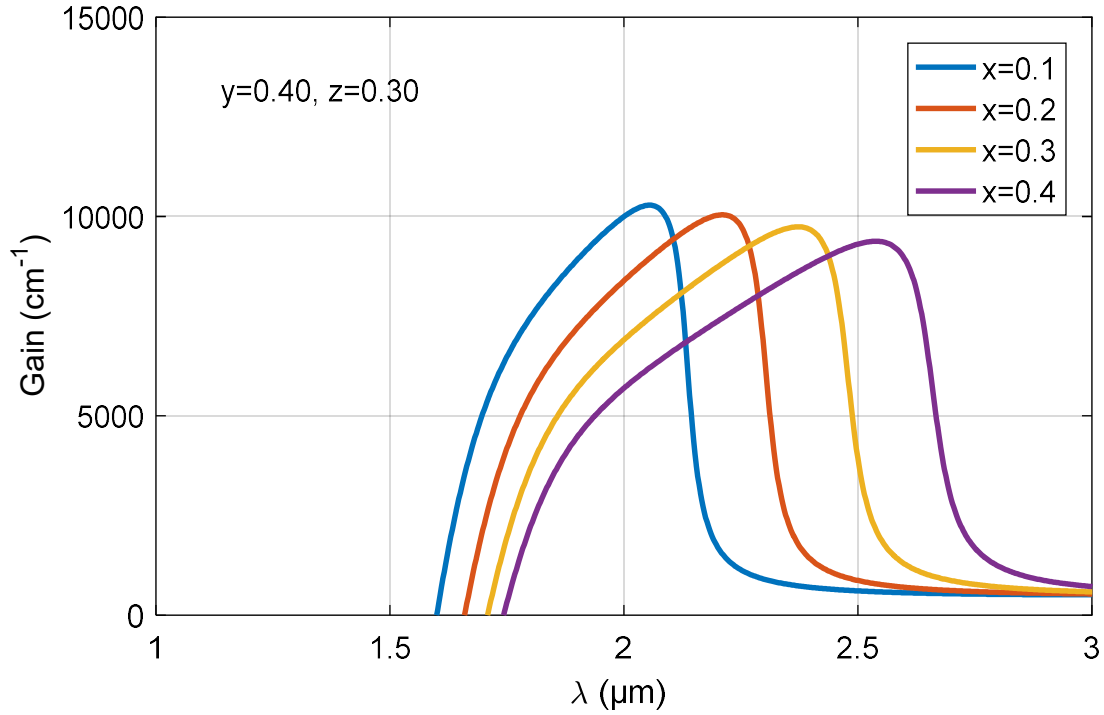


Figure 2.22. Variation du gain en fonction de λ pour différentes concentrations d'In, ($y=0.4$ et $z=0.3$).

2.11. Conclusion

Nous avons présenté une analyse théorique des caractéristiques optoélectroniques d'un puits quantique fait d'InGaAsSb/InGaSb. Les aspects qui déterminent le confinement quantique sont influencés par divers éléments, tels que la masse effective des porteurs de charge et les décalages de bandes dans la bande de conduction, ΔE_c , ainsi que dans la bande de valence, ΔE_v . Nous avons aussi observé que pour augmenter le coefficient de gain optique, il est primordial de réduire les niveaux de concentration d'indium et d'arsenic dans le matériau du puits (InGaAsSb), ainsi que la proportion d'indium dans le substrat (InGaSb), et que la longueur d'onde associée peut être modulée dans la plage infrarouge en fonction des applications visées.

Conclusion générale

Les matériaux semiconducteurs constituent le fondement essentiel de la microélectronique et de l'optoélectronique, permettant la création de dispositifs comme les transistors, les LEDs, les lasers à semi-conducteurs, ainsi que des capteurs et des panneaux solaires.

En conséquence, ces matériaux revêtent une importance vitale dans l'économie contemporaine, en particulier pour les secteurs de la microélectronique et de l'énergie photovoltaïque. En dépit de l'influence de ces secteurs, l'univers des semi-conducteurs reste encore plein de mystères à découvrir et demeure un domaine de recherche très dynamique.

L'exploration d'autres matériaux ouvre la porte à un vaste éventail d'études sur des matériaux extraordinaires, petits et performants.

L'objectif de ce travail est d'étudier les propriétés optoélectroniques de la structure à puits quantiques contraints à base d'InGaAsSb/InGaSb pour les applications optoélectroniques.

Nous avons observé que l'incorporation d'indium dans le matériau de puits accroît la valeur du paramètre de maille tout en réduisant les contraintes dans la structure InGaAsSb/InGaSb, en plus de diminuer les énergies de gap et de spin-orbite, ainsi que la masse effective de tous les porteurs de charge. D'autre part, l'augmentation de la concentration d'arsenic dans cette structure provoquera une hausse de la contrainte et de la masse effective de tous les porteurs de charge, mais entraînera une diminution du paramètre de maille ainsi que des énergies de la bande interdite et de spin-orbite.

L'incorporation d'indium dans le substrat InGaSb entraîne une expansion du paramètre de la maille de ce matériau, modifiant la contrainte au sein de la structure InGaAsSb/InGaSb, tout en augmentant la masse des porteurs lourds. Cependant, cela engendre également une réduction de l'énergie de spin-orbite, de l'énergie de la bande interdite, ainsi que des masses effectives des électrons, des trous légers et de spin-orbite.

L'introduction d'indium et d'arsenic entraîne une augmentation du décalage ΔE_c , ce qui résulte en l'émergence d'un puits de conduction profond. En revanche, l'incorporation d'indium dans le matériau de barrière réduit la valeur de ce décalage. L'incorporation d'In entraîne une augmentation de la valeur de ΔE_v , mais lorsque la concentration d'As dépasse 0.3, le décalage

ΔE_v commence à se réduire. En revanche, l'incorporation d'indium dans le matériau de barrière réduit la valeur de ce décalage.

L'augmentation des niveaux de concentrations d'In et d'As dans le matériau InGaAsSb formant le puits a un impact significatif sur la réduction du maximum du coefficient de gain optique et sur le déplacement de la longueur d'onde associée. D'un autre côté, l'introduction d'In dans la barrière InGaSb affecte beaucoup plus le déplacement de la longueur d'onde d'émission.

Références

- [1] F. Faure, « Notes de cours sur la Mécanique quantique », Université Joseph Fourier, Grenoble, France, 2015.
- [2] G.H. Duan, H. Debrégeas, R. Brenot « Lasers et amplificateurs optiques à semi-conducteurs pour télécommunications optiques », Techniques de l'ingénieur, 2015.
- [3] https://nte.mines-albi.fr/CristalGemme/fr/co/uc_SystemesCristallins.html
- [4] L. Baroura, « Travaux pratiques matériau 1 : TP₂ Indices de Miller », Université frères Mentouri, Constantine 1, Algérie.
- [5] I. Vurgaftman et J. R. J. Meyer, « Band parameters for nitrogen-containing semiconductors », Journal of Applied Physics, vol. 94, no. 6, p. 3675, 2003.
- [6] A. Berthelot, « Diffusion spectrale et rétrécissement par le mouvement dans les boîtes quantiques », Thèse de doctorat, université PARIS VI, France, 2008.
- [7] S. Adachi, « Ternary and quaternary compounds », S. Kasap, P. Capper (Eds.), Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials, 725-741, 2017.
- [8] M. Mokhtari, « Étude physique des défauts induits par les procédés de fabrication de lasers à émission par la surface (VCSEL) à confinement par diaphragme d'oxyde », Thèse de doctorat, université Rennes 1, France, 2019.
- [9] C. Penetier, « Étude des mécanismes de migration du césium dans le dioxyde d'uranium stoechiométrique et sur-stoechiométrique: influence du molybdène », Thèse de doctorat, Université Claude Bernard Lyon 1, France, 2019.
- [10] J. W. Matthews et A. E. Blakeslee, « Defects in epitaxial multilayers. I. Misfit dislocations », Journal of Crystal Growth, vol 27, p. 118-125.
- [11] Y. El Bouznani, « Les dislocations au niveau des matériaux métalliques », Maroc, 2014.
- [12] A. Aissat, « Modélisation et simulation du gain optique et du courant de seuil d'un laser à puits quantique contraint à base de $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$ », Thèse de doctorat, ENP El harrach, Algérie, 2007.
- [13] S. Baily, « Vers l'optique en rayons gamma », www.pourlascience.fr/sd/physique/vers-l-optique-en-rayons-gamma-11351.php, 2012.